# Approximationsverfahren zur Gewinnung von ableitungsfreien Schranken für Quadraturfehler

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften
der Mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
**Franz Locher**
aus Fridingen, Kreis Tuttlingen

1968

9617

# Approximationsverfahren zur Gewinnung von ableitungsfreien Schranken für Quadraturfehler

DISSERTATION
zur Erlangung des Grades eines Doktors
der Naturwissenschaften
der Mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät
der Eberhard-Karls-Universität zu Tübingen

vorgelegt von
**Franz Locher**
aus Fridingen, Kreis Tuttlingen

1968

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41547601_0047

Tag der mündlichen Prüfung: 27.6.1968

Dekan: Prof. Dr. H. Blume

1. Berichterstatter: Prof. Dr. K. Zeller

2. Berichterstatter: Dozent Dr. M. Reimer

Inhaltsverzeichnis

§ 0. Einleitung 1

Kapitel I. Methoden zur Gewinnung ableitungsfreier Schranken für Quadraturfehler

§ 1. Grundlagen 4

§ 2. Ableitungsfreie Schranken für Quadraturfehler 9

§ 3. Berücksichtigung der Schrittweite 17

§ 4. Numerisch günstige Abschätzungen bei Vielpunktformeln 24

§ 5. Verwendung der Einflußfunktion 33

Kapitel II. Untersuchung einiger spezieller Quadraturformeln

§ 6. Formeln von Gauß, Radau und Lobatto 40

§ 7. Das Verfahren von Clenshaw-Curtis 46

§ 8. Fehlerabschätzungen für das Verfahren von Romberg 49

§ 9. Fehlerschranken für Gregory-Formeln 54

§10. Numerische Integration von Funktionen mehrerer Variablen 56

Literaturverzeichnis 59

## § 0. Einleitung

Die üblichen Fehlerabschätzungen für numerische Integrationsverfahren, welche für Polynome von höchstens n-tem Grad exakt sind, enthalten die (n+1)-te Ableitung des Integranden. Schranken für die Ableitungen einer Funktion sind aber numerisch nur schwer zu gewinnen. Vor einigen Jahren hat deshalb DAVIS [1953] ableitungsfreie Fehlerabschätzungen eingeführt. Er betrachtet zu diesem Zweck Funktionen, welche vom Integrationsintervall aus analytisch ins Komplexe fortgesetzt werden können. Diese Funktionen lassen sich als Elemente eines geeignet gewählten Hilbert-Raumes auffassen, auf welchem der Quadraturfehler $R_n(f)$ eine stetige Linearform darstellt. Den Ausgangspunkt für die Untersuchungen von DAVIS bildet die Ungleichung

$$(0.1) \qquad |R_n(f)| \leq \|R_n\| \cdot \|f\| \ .$$

Auf Grund dieser Beziehung läßt sich nun der Quadraturfehler ohne explizite Verwendung von Ableitungen bequem abschätzen. Das Verfahren wurde ausgebaut: DAVIS-RABINOWITZ [1954], DAVIS [1962], HÄMMERLIN [1963, 1965, 1966], LO-LEE-SUN [1965]. Manche der Ergebnisse lassen sich mittels Reihenentwicklungen bequemer formulieren (WILF [1964], STETTER [1966, 1968]).

Abschätzungen vom Typ (0.1) sind nicht auf Hilbert-Räume beschränkt. Wir werden deshalb unseren Untersuchungen den mit der sup-Norm versehenen Raum der stetigen Funktionen auf einem kompakten Intervall zugrunde legen. Wenn man beachtet, daß $R_n$ für Polynome von höchstens n-tem Grad

verschwindet, erhält man die Fehlerschranke (vgl. DAVIS-RABINOWITZ [1966], STROUD [1966], ZELLER [1966])

$$(0.2) \qquad |R_n(f)| \leq \|R_n\| \cdot E_n(f) .$$

Hier und im folgenden bezeichne $E_n(f)$ die algebraische Approximationskonstante. Derartige Abschätzungen wurden auch in anderen Gebieten der Numerischen Mathematik verwendet, so etwa bei der Untersuchung der Konvergenz von Interpolationsprozessen (vgl. NATANSON [1955]). Trotz ihrer Einfachheit liefert die obige Abschätzung (0.2) überraschend scharfe Schranken. Sehr günstig sind diese Fehlerschranken etwa für die Gauß-Formeln, weil diese für Polynome von hohem Grad exakt sind (vgl. STROUD [1966]). Für den Nutzen der Methode ist es günstig, daß die verwendeten Approximationsgrößen auch numerisch recht gut zugänglich sind; s. etwa EHLICH-ZELLER [1964, 1965].

Im ersten Teil der Arbeit erläutern wir die Abschätzungsmethode und vergleichen sie mit anderen Verfahren. An einigen Stellen, so etwa bei der Untersuchung der zusammengesetzten Newton-Cotes-Formeln, werden numerische Fragen im Vordergrund stehen. Mit Hilfe von Reihenentwicklungen werden wir für Quadraturformeln, welche in den m Intervallen $[-1+h\nu, -1+h(\nu+1)]_{\nu = 0,1,\ldots,m-1}$ der Länge $h = \frac{2}{m}$ für Polynome von höchstens n-tem Grad exakt sind, Abschätzungen der Form

$$(0.3) \qquad |R_n(f)| \leq c \cdot h^{n+1} \cdot E_n(f)$$

gewinnen, wobei $E_n(f)$ die auf das Intervall $[-1,1]$ bezogene

algebraische Approximationskonstante bezeichne. Durch Vergleich der Einflußfunktionen des Quadraturfehlers $R_n(f)$ und der diskreten Approximationskonstanten $L_n(f)$ bezüglich gewisser Čebyšev-Knoten werden wir weitere ableitungsfreie Fehlerschranken herleiten.

Im zweiten Teil der Arbeit gehen wir genauer auf verschiedene Quadraturverfahren ein und untersuchen, wie gut sich unsere Abschätzungsmethode für diese eignet. Auf die Methode von CLENSHAW-CURTIS [1960] lassen sich unsere Abschätzungen ähnlich günstig wie auf die Gauß-Formeln anwenden. Feinere Untersuchungen ergeben auch für das Verfahren von ROMBERG und für die Gregory-Formeln brauchbare Schranken. Zum Schluß weisen wir darauf hin, daß sich die Abschätzungsmethode auch auf numerische Integrationsverfahren von Funktionen mehrerer Variabler übertragen läßt.

Herrn Prof. Dr. K. Zeller möchte ich für die Anregung zu dieser Arbeit und für wertvolle Ratschläge herzlich danken.

## Kapitel I: Methoden zur Gewinnung ableitungsfreier Schranken für Quadraturfehler

### § 1. Grundlagen

Es sei $C(a,b)$ der Vektorraum der reellwertigen, stetigen Funktionen auf dem kompakten Intervall $[a,b]$ der reellen Achse. $C(a,b)$ sei in der üblichen Weise durch

$$(1.1) \qquad \|f\| = \max_{a \le x \le b} |f(x)| \qquad \text{für} \quad f \in C(a,b)$$

normiert. Bekanntlich ist $C(a,b)$ unter dieser Norm vollständig.

Zur numerischen Integration einer Funktion $f \in C(a,b)$ verwenden wir Quadraturformeln der folgenden Art

$$(1.2) \quad \begin{cases} \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{m} a_k f(x_k) + R_n(f) \\ R_n(P_n) = 0 \quad \text{für Polynome vom Grad } P_n \le n \\ \qquad\qquad\qquad\qquad (\text{wo } n \ge 0)\ ; \end{cases}$$

es wird dabei vorausgesetzt, daß die Stützstellen (Knoten) $x_k$ im Intervall $[a,b]$ liegen. Eine Formel vom Typ (1.2) nennen wir exakt vom Grade n. Sie heißt insbesondere eine Interpolationsquadraturformel, falls die Gewichte $a_k$ die Integrale der Lagrange-Grundfunktionen $l_k(x)$ zu den Knoten $x_k$ für $k = 0,1,\ldots,n$ über das Intervall $[a,b]$ sind.

Wir werden uns im folgenden auf das Intervall $[-1,1]$ beschränken. Dies bedeutet keine wesentliche Einschränkung

der Allgemeinheit, da sich die Intervalle $[a,b]$ und $[-1,1]$ durch die linearen Transformationen

$$x = \frac{2t - a - b}{b - a} \qquad \text{mit } t \in [a,b]$$

(1.3)

$$t = \frac{(b-a)x + a + b}{2} \qquad \text{mit } x \in [-1,1]$$

eineindeutig aufeinander abbilden lassen.

Zur Abschätzung des Quadraturfehlers $R_n(f)$ werden wir die algebraische Approximationskonstante

$$(1.4) \qquad E_n(f) = \inf \left\{ \|f - P_n\| \;\middle|\; \begin{array}{l} P_n(x)\text{: Polynom vom} \\ \text{Grad } P_n \leq n \end{array} \right\}$$

heranziehen. Aus der Approximationstheorie ist bekannt, daß zu jedem $f \in C(-1,1)$ ein eindeutig bestimmtes Polynom $P_n^*$ mit

$$(1.5) \qquad E_n(f) = \|f - P_n^*\|$$

existiert. Dieses Polynom $P_n^*$ wird als Minimalpolynom (Minimallösung) für die Funktion f bezüglich des (n+1)-dimensionalen Raumes $V_n$ der Polynome von höchstens n-tem Grad bezeichnet. Es ist dadurch charakterisiert, daß für die Fehlerfunktion $f(x) - P_n^*(x)$ eine Alternante der Länge n+2 existiert (vgl. MEINARDUS [1964]).

Für numerische Anwendungen ist es günstig, daß sich die Größe $E_n(f)$ auf relativ einfache Weise gewinnen läßt (vgl. EHLICH-ZELLER [1964,1965]). Ein weiterer Vorteil ist der, daß $E_n(f)$ für nicht zu große n im allgemeinen schon klein ist. Zumindest aber sichert der Approximationssatz von

Weierstraß, daß $E_n(f)$ für hinreichend große n beliebig klein wird. Über die höheren Ableitungen einer Funktion kann man dagegen meist keine Aussagen machen, die Fälle ausgenommen, wo sich f durch einen einfachen analytischen Ausdruck darstellen läßt. Wegen dieser günstigen Eigenschaften wurde die Approximationskonstante schon in verschiedenen Gebieten der Approximationstheorie und der Numerischen Mathematik verwendet. Viele dieser Abschätzungen beruhen auf dem im folgenden Lemma 1.1 verwendeten Prinzip.

Lemma 1.1.

Es seien X, Y zwei normierte Räume. R sei eine stetige lineare Abbildung von X in Y mit dem Nullraum $V = \left\{ g \in X \;\middle|\; R(g) = 0 \right\}$. $\varrho_V(f)$ sei die Approximationskonstante von f bezüglich V:

$$\varrho_V(f) = \inf_{g \in V} \left\| f - g \right\| \quad . \tag{1.6}$$

Dann gilt die Abschätzung

$$\left\| R(f) \right\| \leq \left\| R \right\| \cdot \varrho_V(f) \quad . \tag{1.7}$$

Beweis:

Es sei $f \in X$ beliebig gewählt. Wegen (1.6) gibt es zu jedem $\varepsilon > 0$ ein $g \in V$ mit

$$\left\| f - g \right\| < \varrho_V(f) + \varepsilon \quad . \tag{1.8}$$

Hieraus folgt mit Hilfe der Beziehung $R(f) = R(f - g)$ die Behauptung (1.7).

Als Folgerung aus dem obigen Lemma erhält man etwa die folgende Abschätzung des Interpolationsfehlers (NATANSON [1955], S. 389 f.):

$$(1.9) \qquad \left\| L_n(f) - f \right\| \leq \left\{ \lambda_n + 1 \right\} \cdot E_n(f) \quad .$$

Es bedeutet hier $L_n(f)$ das Interpolationspolynom von höchstens n-tem Grad für die Funktion f über n+1 verschiedene Knoten aus dem Intervall $[-1,1]$. Die Größen $\lambda_n$ seien die zugehörigen Lebesgue-Konstanten der Interpolation.

Auf ähnliche Weise läßt sich auch der Fehler der n-ten Partialsumme der Fourier-Reihe abschätzen. Als weitere Folgerung erhalten wir eine Fehlerabschätzung für Differentiationsformeln.

Korollar 1.2:

Für $x \in [-1,1]$ betrachten wir die Differentiationsformel

$$(1.10) \qquad \begin{cases} f'(x) = \sum_{K=0}^{m} a_k \cdot f(x_k) + r(f;x) \\ r(P_n;x) = 0 \quad \text{für Polynome vom Grad } P_n \leq n \quad . \end{cases}$$

Dann gilt die Abschätzung

$$(1.11) \qquad \left\| r(f) \right\| \leq \left\{ 1 + \sum_{K=0}^{m} |a_k| \right\} \cdot E_{n-1}(f') \quad .$$

Beweis:

Es sei $P_{n-1}(x)$ das Polynom bester Approximation von höchstens (n-1)-tem Grad für f'(x). Wir setzen

$$(1.12) \qquad P_n(x) = \int_{-1}^{x} P_{n-1}(t)\, dt \quad .$$

Beweis:

Es sei $P_{n-1}(x)$ das Polynom bester Approximation von höchstens (n-1)-tem Grad für f'(x). Wir setzen

$$(1.12) \qquad P_n(x) = \int_0^x P_{n-1}(t)\,dt + f(0) \quad .$$

Dann gilt

$$(1.13) \qquad \begin{aligned} |r(f;x)| &= |r(f-P_n;x)| \\ &\leq \|f' - P_n'\| + \sum_{k=0}^{m} |a_k| \cdot |f(x_k) - P_n(x_k)| \\ &\leq \left\{1 + \sum_{k=0}^{m} |a_k|\right\} \cdot \|f' - P_n'\| \quad . \end{aligned}$$

Hieraus folgt die Behauptung.

Eine weitere Anwendung von Lemma 1.1 auf die Fehlerabschätzung von Quadraturformeln behandeln wir im folgenden.

## § 2. Ableitungsfreie Schranken für Quadraturfehler

Die üblichen Fehlerabschätzungen für numerische Integrationsverfahren enthalten eine höhere Ableitung des Integranden an einer im allgemeinen unbekannten Stelle des Integrationsintervalls. Da höhere Ableitungen, sofern sie überhaupt existieren, meist nur mit großem numerischem Aufwand zu bestimmen sind, liegt die Frage nahe, ob sich ableitungsfreie Schranken für Quadraturfehler gewinnen lassen. DAVIS [1953, 1962] hat gezeigt, daß sich solche Fehlerabschätzungen ermitteln lassen, falls der Integrand in einem geeigneten Gebiet holomorph ist. Das Verfahren wurde ausgebaut (DAVIS-RABINOWITZ [1954], HÄMMERLIN [1963, 1965, 1966], LO-LEE-SUN [1965]). Von BARNHILL-WIXOM [1967] wurden auch Quadraturformeln bestimmt, für welche diese Abschätzungsverfahren einen minimalen Fehler liefern. Mittels Reihenentwicklungen lassen sich manche der Ergebnisse besser formulieren (STETTER [1966, 1968], WILF [1964]). Für die Praxis scheinen diese Abschätzungen aber nicht immer besonders gut geeignet zu sein, da man gewisse "komplexe" $L_2$-Normen des Integranden kennen muß, welche sich nicht ohne numerischen Aufwand gewinnen lassen.

Weniger beachtet wurde dagegen, daß man ableitungsfreie Quadraturfehlerschranken auch mit Hilfe der Approximationskonstanten gewinnen kann. In neuerer Zeit wurde aber wieder auf diese Möglichkeit hingewiesen (vgl. DAVIS-RABINOWITZ [1966, S. 122 ff.], STROUD [1966], ZELLER [1966]). Eine genauere Untersuchung dieser Abschätzungsmethode zeigt,

daß sie trotz ihrer Einfachheit zu überraschend guten Schranken führt.

Als Folgerung aus Lemma 1.1 erhalten wir den geläufigen

Satz 2.1. (vgl. DAVIS-RABINOWITZ [1966], ZELLER [1966])

Für die Quadraturformel

$$(2.1)\quad \begin{cases} \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{m} a_k \cdot f(x_k) + R_n(f) & \text{mit} \\ R_n(P_n) = 0 & \text{für Polynome vom Grad } P_n \leq n \ (\text{wo } n \geq 0) \end{cases}$$

gilt die Fehlerabschätzung

$$(2.2)\quad \left|R_n(f)\right| \leq \left\{ 2 + \sum_{k=0}^{m} \left|a_k\right| \right\} \cdot E_n(f) \quad .$$

Sind die Gewichte $a_k$ nichtnegativ, so gilt

$$(2.3)\quad \left|R_n(f)\right| \leq 4 \cdot E_n(f) \quad .$$

Der Beweis folgt ohne Schwierigkeiten aus Lemma 1.1.

In der Ungleichung (2.2) stellt die Größe

$$(2.4)\quad c = 2 + \sum_{k=0}^{m} \left|a_k\right|$$

eine obere Schranke für die Norm der Linearform $R_n$ dar. Wir untersuchen die Frage, ob sich diese Schranke verbessern läßt.

Satz 2.2.

Im Raum $C(-1,1)$ läßt sich die Abschätzung (2.2) nicht verbessern.

Beweis:

Es genügt zu zeigen, daß es eine Folge stetiger Funktionen $f_\mu(x)$ mit den Eigenschaften

$$\lim_{\mu\to\infty} R_n(f_\mu) = 2 + \sum_{k=0}^{m} |a_k| \quad . \tag{2.5}$$

$$E_n(f_\mu) = 1 \qquad (\mu = 1,2,3,\ldots) \tag{2.6}$$

gibt. Wir definieren die Funktionen $f_\mu(x)$ stückweise linear auf folgende Weise: In den Quadraturknoten $x_k$ $(k = 0,1,\ldots,m)$ setzen wir

$$f_\mu(x_k) = -\operatorname{sign} a_k \qquad (k = 0,1,\ldots,m) \; . \tag{2.7}$$

In n+2 weiteren Punkten $x_{m+1} < \ldots < x_{m+n+2} \in [-1,1]$ definieren wir

$$f_\mu(x_k) = (-1)^{k-(m+1)} \qquad (k = m+1,\ldots,m+n+2) \; . \tag{2.8}$$

(Diese Punkte ergeben die Alternantenpunkte.) Es sei

$$d = \min \left\{ |x_i - x_k| \;\middle|\; i \neq k;\ i,k = 0,\ldots,m+n+2 \right\} . \tag{2.9}$$

In den Intervallen $[x_k - 2^{-\mu}d, x_k]$ bzw. $[x_k, x_k + 2^{-\mu}d]$ soll $f_\mu(x)$ linear von $f_\mu(x_k - \frac{d}{2^\mu}) = 1$ nach $f_\mu(x_k)$ bzw. von $f_\mu(x_k)$ nach $f_\mu(x_k + \frac{d}{2^\mu}) = 1$ verlaufen. In den übrigen Punkten von $[-1,1]$ setzen wir $f_\mu(x) = 1$ (vgl. Skizze 1).

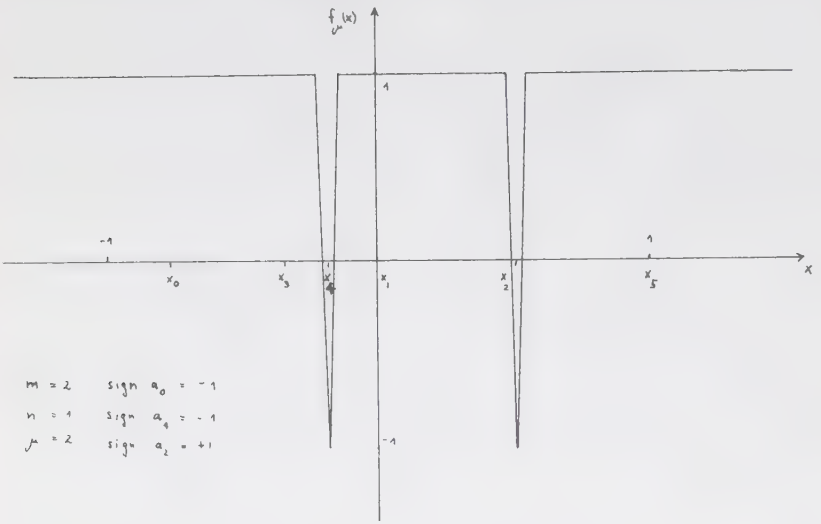
Bemerkung 2.3.

Auf Grund des Approximationssatzes von Weierstraß gibt es sogar eine Folge von Polynomen $P_\mu(x)$ mit den Eigenschaften

$$(2.10)\qquad \lim_{\mu\to\infty} R_n(P_\mu) = 2 + \sum_{k=0}^{m} |a_k|$$

$$\lim_{\mu\to\infty} E_n(P_\mu) = 1 \quad .$$

Skizze 1




Der obige Satz 2.2 und die Bemerkung 2.3 legen die Vermutung nahe, daß die Abschätzungen (2.2) und (2.3) zumindest in manchen Fällen recht günstig sind. Um unsere Abschätzungsmethode mit bekannten Abschätzungen vergleichen zu können, verwenden wir eine obere Schranke für $E_n(f)$, welche von Bernstein gefunden wurde.

Lemma 2.4. (BERNSTEIN, vgl. PASZKOWSKI [1962], S. 55.)
Im Intervall $[a,b]$ besitze die Funktion $f(x)$ eine $(n+1)$-te Ableitung. Dann gilt

$$(2.11)\qquad E_n(f) \leq \sup_{x\in[a,b]} \frac{\left|f^{(n+1)}(x)\right| (b-a)^{n+1}}{2^{2n+1}\,(n+1)!} \quad .$$

Für Quadraturformeln mit positiven Gewichten $a_k$ erhält man somit aus Satz 2.1

$$(2.12) \qquad |R_n(f)| \leq \frac{\|f^{(n+1)}\|}{2^{n-2}\cdot(n+1)!} \quad .$$

Die Abschätzung (2.12) können wir nun mit den üblichen Fehlerschranken vergleichen, die auch gerade den Faktor $f^{(n+1)}(x)$ enthalten. Die folgende Tabelle enthält jeweils die Koeffizienten der (n+1)-ten Ableitung. (Die Fehlerschranken sind bei HILDEBRAND [1956, S. 73 und S. 330 ff.] zusammengestellt.)

Tabelle 1

| Formel | n | I | II | II:I |
|---|---|---|---|---|
| | | bisherige Schranke | $4\cdot E_n(f)$-Schranke | Verhältnis d.beid.Schra. |
| Trapez-Regel | 1 | $\frac{2}{3}$ | 1 | 1.5 |
| Si-Regel | 3 | $\frac{1}{90}$ | $\frac{1}{48}$ | 1.9 |
| $\frac{3}{8}$-Regel | 3 | $\frac{2}{405}$ | $\frac{1}{48}$ | 4.3 |
| 5-Pkt.-NCotes | 5 | $\frac{1}{16\,945}$ | $\frac{1}{8\cdot 6!}$ | 2.6 |
| 6-Pkt.-NCotes | 5 | $\frac{275}{12\,096}\cdot\left(\frac{2}{5}\right)^7$ | $\frac{1}{8\cdot 6!}$ | 5.0 |
| 7-Pkt.-NCotes | 7 | $\frac{9}{1\,400}\cdot\left(\frac{1}{3}\right)^9$ | $\frac{1}{32\cdot 8!}$ | 2.4 |
| Gauß-Čebyšev | 2m+1 | $\frac{2\pi}{2^{2m+2}\cdot(2m+2)!}$ | $\frac{4}{2^{2m+1}\cdot(2m+2)!}$ | $\frac{4}{\pi}$ |

Wir haben in der obigen Tabelle 1 einige der wichtigsten Quadraturformeln mit den zugehörigen Quotienten der beiden Fehlerschranken zusammengestellt. Man ersieht aus der Tabelle, daß unsere Abschätzungsmethode bei den Gauß-Čebyšev-Formeln und den Newton-Cotes-Formeln mit ungerader Stützstellenzahl wegen des hohen Genauigkeitsgrades dieser Quadraturverfahren günstige Ergebnisse liefert. Für die zusammengesetzten Newton-Cotes-Formeln haben wir in den obigen Abschätzungen die Schrittweite noch nicht berücksichtigt. Dies bereitet aber keine Schwierigkeiten, wie sich in Paragraph 4 (vgl. (4.6) und (4.7)) zeigen wird.

Vergleich mit optimalen Abschätzungsverfahren

Unsere Abschätzungsmethode ist unabhängig von der speziellen Lage der Quadraturknoten. Die Fehlerschranken hängen nur vom Genauigkeitsgrad der Quadraturformeln ab. Für einige Abschätzungsmethoden sind Formeln bekannt, welche einen minimalen Fehler ergeben. Ein Vergleich mit diesen Abschätzungen gibt uns weitere Hinweise, wie günstig unsere Fehlerschranken sind. In diesem Zusammenhang weisen wir auch auf die Arbeiten von BARNHILL-WIXOM [1967] hin; dort werden im Rahmen der $L_2$-Abschätzungen in einigen Fällen die optimalen Formeln bestimmt.

a) Bei Interpolationsquadraturformeln mit den Knoten $x_i$ $(i = 0,1,\ldots,n)$ gilt die Fehlerschranke (vgl. KRYLOV [1962], S. 81):

$$(2.13) \qquad \left|R_n(f)\right| \leq \frac{\left\|f^{(n+1)}\right\|}{(n+1)!} \int_{-1}^{1} \left|(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)\right| \, dx \, .$$

Das Integral in (2.13) hat einen minimalen Wert, falls die Knoten $x_i$ die Nullstellen des Čebyšev-Polynoms zweiter Art $U_{n+1}(x)$ sind. Dann gilt (vgl. KRYLOV [1962], S. 32)

$$(2.14) \qquad \left|R_n(f)\right| \leq \frac{\left\|f^{(n+1)}\right\|}{2^n \cdot (n+1)!} \, .$$

Ein Vergleich mit (2.12) ergibt eine Vergröberung um einen Faktor 4.

b) Aus der Taylorschen Formel mit Restglied in der Integralform erhält man Fehlerabschätzungen vom Peano-Typ

$$(2.15) \qquad \left|R_n(f)\right| \leq \max_{x \in [a,b]} \left|f^{(n+1)}(x)\right| \cdot \int_a^b \left|K(t)\right| \, dt \, .$$

Für $n = 1$ und $[a,b] = [0,1]$ kennt man diejenige Formel, welche $\int_0^1 \left|K(t)\right| \, dt$ minimiert. Es gilt (vgl. KRYLOV [1962], S. 152)

$$(2.16) \qquad \left|R_1(f)\right| \leq \max_{x \in [0,1]} \left|f''(x)\right| \cdot \frac{1}{8} \cdot \left(\frac{1}{\sqrt{3} + 2}\right)^2 .$$

Die Trapez-Regel enthält den Faktor $\frac{1}{12}$ bei der Ableitung; dies bedeutet eine Vergröberung um ungefähr einen Faktor 9. Die Abschätzung (2.12) ergibt den Faktor $\frac{1}{8}$ oder eine Vergröberung um etwa einen Faktor 14. Dieses Ergebnis überrascht nicht, da ja schon die Trapez-Regel im Vergleich zur optimalen Formel ziemlich ungünstig ist.

Bemerkung 2.5.

Durch die Verwendung der Bernsteinschen Abschätzung (2.11), welche zur Ungleichung (2.12) und in den folgenden Paragraphen zu weiteren Abschätzungen führt, könnte der Eindruck entstehen, daß die Abschätzungen (2.2) und (2.3) zumindest implizit Ableitungen enthalten. Wir weisen deshalb darauf hin, daß die Ungleichung (2.12) und auch einige Abschätzungen von ähnlichem Typ, welche wir in den folgenden Paragraphen gewinnen, nur zum Vergleich mit den üblichen Fehlerschranken dienen. Für Fehlerabschätzungen verwenden wir dagegen die Ungleichungen (2.2) und (2.3); die auftretende Approximationskonstante $E_n(f)$ läßt sich numerisch ohne Kenntnis von Ableitungen abschätzen.

## § 3. Berücksichtigung der Schrittweite

Falls f einer noch näher zu bestimmenden Funktionenklasse angehört, läßt sich, wie wir nun zeigen werden, für die Trapez-Regel eine Abschätzung der Form

$$(3.1) \qquad |R_1(f)| \leq c\, h^2\, E_1(f)$$

mit einer von h unabhängigen Konstanten c gewinnen. Auf Grund von Satz 2.2 ist dies unter der alleinigen Voraussetzung, daß f stetig ist, nicht möglich. Falls f zweimal differenzierbar ist, ist nach der Bernsteinschen Ungleichung (2.11) eine Abschätzung der Form (3.1) zu erwarten (s. auch Lemma 4.1 und (4.7)). An wesentlicher Stelle nützen wir das hinreichend schnelle Abfallen der Koeffizienten $\alpha_\nu$ in der Entwicklung

$$(3.2) \qquad f(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_\nu \cdot \check{C}_\nu(x)$$

von f nach Čebyšev-Polynomen aus. Im Rahmen der $L_2$-Abschätzungen hat HÄMMERLIN [1965, 1966] ähnliche Abschätzungen hergeleitet.

Wir betrachten Funktionen f(x), für welche die Reihe (3.2) im Intervall $[-1,1]$ gleichmäßig konvergiert. Dann gilt

$$(3.3) \qquad R_n(f) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \alpha_\nu \cdot R_n(\check{C}_\nu) \,.$$

Im folgenden betrachten wir die Trapez-Regel zur Schrittweite $h = \frac{2}{m}$:

$$(3.4) \qquad \int_{-1}^{1} f(x)\, dx = h \cdot \left\{ \frac{1}{2} \cdot f(-1) + f(-1+h) + \ldots + \frac{1}{2} \cdot f(1) \right\} + R_1(f)$$

Andere Quadraturformeln - etwa die Simpson-Regel - lassen sich ähnlich behandeln. Aus (3.3) erhalten wir

aus Symmetriegründen

$$(3.5) \qquad R_1(f) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \alpha_{2\nu} \cdot R_1(\check{C}_{2\nu}) \quad .$$

Falls $\alpha_2 \neq 0$ ist, folgt hieraus

$$(3.6) \qquad \left|R_1(f)\right| \leq \left|\alpha_2\right| \frac{2}{3} h^2 \cdot \left\{ 1 + \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{\left|\alpha_{2\nu}\right|}{\left|\alpha_2\right|} \frac{\left|R_1(\check{C}_{2\nu})\right|}{\frac{2}{3} \cdot h^2} \right\} \quad .$$

Für viele Funktionen des Typs (3.2) hat $\left|\alpha_2\right|$ die Größenordnung von $E_1(f)$. Es gilt nämlich (vgl. MEINARDUS [1964], S. 82)

$$(3.7) \qquad \left| \sum_{\mu=0}^{\infty} \alpha_{2(2\mu+1)} \right| \leq E_1(f) \quad .$$

Falls $\left|\alpha_2\right| \geq \sum_{\mu=1}^{\infty} \left|\alpha_{2(2\mu+1)}\right|$ ist, erhalten wir aus (3.7)

$$(3.8) \qquad \left|\alpha_2\right| - \sum_{\mu=1}^{\infty} \left|\alpha_{2(2\mu+1)}\right| \leq E_1(f) \quad .$$

Daraus erhalten wir eine Abschätzung von $\left|\alpha_2\right|$ nach oben

$$(3.9) \qquad \left|\alpha_2\right| \leq \frac{E_1(f)}{1 - \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{\left|\alpha_{2(2\mu+1)}\right|}{\left|\alpha_2\right|}} \quad .$$

Dies setzen wir in (3.6) ein und erhalten

$$(3.10) \qquad \left|R_1(f)\right| \leq \frac{2}{3} h^2 \cdot \frac{1 + \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{\left|\alpha_{2\nu}\right|}{\left|\alpha_2\right|} \cdot \frac{\left|R_1(\check{C}_{2\nu})\right|}{\frac{2}{3} h^2}}{1 - \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{\left|\alpha_{2(2\mu+1)}\right|}{\left|\alpha_2\right|}} \cdot E_1(f)$$

Wir schätzen $\left|R_1(\check{C}_{2\nu})\right|$ nach oben ab (Markov-Ungleichung)

$$(3.11) \qquad \left|R_1(\check{C}_{2\nu})\right| \leq \frac{h^2}{6} \frac{4\nu^2 \cdot (4\nu^2 - 1)}{3}$$

und erhalten aus (3.10)

$$(3.12) \qquad \left|R_1(f)\right| \leq \frac{2}{3} h^2 \cdot \frac{1 + \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{\left|\alpha_{2\nu}\right|}{\left|\alpha_2\right|} \cdot \frac{\nu^2 \cdot (4\nu^2 - 1)}{3}}{1 - \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{\left|\alpha_{2(2\mu+1)}\right|}{\left|\alpha_2\right|}} \cdot E_1(f) \quad .$$

Wir setzen

$$(3.13) \qquad H(f) = \frac{2}{3} \cdot \frac{1 + \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{|\alpha_{2\nu}|}{|\alpha_2|} \cdot \frac{\nu^2 \cdot (4\nu^2-1)}{3}}{1 - \sum_{\mu=1}^{\infty} \frac{|\alpha_{2(2\mu+1)}|}{|\alpha_2|}} \quad .$$

Dann haben wir also in (3.12) eine Abschätzung vom Typ

$$(3.14) \qquad \left| R_1(f) \right| \leq H(f) \cdot h^2 \cdot E_1(f) \quad ,$$

wo H(f) von h unabhängig ist.

Abschätzung von H(f)

In der Fehlerschranke (3.13) stört, daß der Term H(f), der die Čebyšev-Koeffizienten enthält, explizit auftritt. Wir werden im folgenden H(f) durch eine von f unabhängige Schranke $\hat{H}$ ersetzen. Wir benötigen dafür Abschätzungen für die Größen $\alpha_\nu$. Es sei f im Innern einer Ellipse $\mathcal{E}_\kappa$ mit den Brennpunkten +1 und -1 und der Halbachsensumme $\kappa = a+b > 1$ holomorph, in der abgeschlossenen Ellipse stetig und reell für reelles Argument. Dann gilt nach Bernstein (vgl. MEINARDUS [1964], S. 84)

$$(3.15) \qquad \left| \alpha_\nu \right| \leq \frac{2 \cdot M(\kappa)}{\kappa^\nu} \quad , \text{ wo } \quad M(\kappa) = \sup_{z \in \mathcal{E}_\kappa} \left| f(z) \right| \quad .$$

Diese Schranken für die Koeffizienten $\alpha_\nu$ lassen sich für spezielle Funktionenklassen noch verbessern (s. etwa ELLIOT [1964], ELLIOT-SZEKERES [1965]). Mit (3.15) erhalten wir für H(f) die Abschätzung

$$(3.16) \qquad H(f) \leq \frac{2}{3} \cdot \frac{1 + \frac{2 \cdot M(\kappa)}{|\alpha_2|} \cdot \sum_{\nu=2}^{\infty} \frac{\nu^2 \cdot (4\nu^2-1)}{3 \cdot \kappa^{2\nu}}}{1 - \frac{2 \cdot M(\kappa)}{|\alpha_2|} \cdot \sum_{\mu=1}^{\infty} \kappa^{-2(2\mu+1)}} \quad .$$

Die auftretenden Reihen können wir geschlossen auswerten

(für die Reihe im Zähler s. STALLEY [1949]) und erhalten

$$(3.17) \qquad H(f) \leq \frac{2}{3} \cdot \frac{1 + \frac{2 \cdot M(\varkappa)}{|\alpha_2|} \cdot \frac{\varkappa^{10} + 58\varkappa^8 + 14\varkappa^6 + 35\varkappa^4 - 15\varkappa^2 + 3}{3\varkappa^2 \cdot (\varkappa^2 - 1)^5}}{1 - \frac{2 \cdot M(\varkappa)}{|\alpha_2|} \cdot \frac{1}{\varkappa^2 \cdot (\varkappa^4 - 1)}} .$$

Wir betrachten nun die Klasse der Funktionen, welche der Bedingung

$$(3.18) \qquad \frac{2 \cdot M(\varkappa)}{|\alpha_2|} \leq c$$

genügen. Dann gilt mit der von f unabhängigen Schranke

$$(3.19) \qquad \hat{H}(c,\varkappa) := \frac{2}{3} \cdot \frac{1 + C \cdot \frac{\varkappa^{10} + 58\varkappa^8 + 14\varkappa^6 + 35\varkappa^4 - 15\varkappa^2 + 3}{3\varkappa^2 \cdot (\varkappa^2 - 1)^5}}{1 - \frac{c}{\varkappa^2 \cdot (\varkappa^4 - 1)}}$$

die Fehlerabschätzung

$$(3.20) \qquad \left| R_1(f) \right| \leq \hat{H}(c,\varkappa) \cdot h^2 \cdot E_1(f) .$$

Wir fassen die bisherigen Ergebnisse zusammen.

Satz 3.1.

Voraussetzungen:

a) Es sei f im Innern einer Ellipse $\mathcal{E}_\varkappa$ des oben beschriebenen Typs holomorph, in der abgeschlossenen Ellipse jedenfalls stetig und reell für reelles Argument.

b) $\alpha_2 \neq 0$ , $\sum_{\nu=1}^{\infty} \left| \alpha_{2(2\nu+1)} \right| \leq 2 \cdot |\alpha_2|$ .

c) $\frac{2 \cdot M(\varkappa)}{|\alpha_2|} \leq c$ .

Behauptung:

Dann gilt mit $\hat{H}(c,\varkappa)$ aus (3.19) für die Trapez-Regel (3.4) die Fehlerabschätzung

$$(3.21) \qquad \left| R_1(f) \right| \leq \hat{H}(c,\varkappa) \cdot h^2 \, E_1(f) .$$

Verbesserung der Abschätzung (3.20)

Eine Analyse der Herleitung von (3.21) zeigt, daß sich die recht grobe Abschätzung (3.11) des Fehlers der Čebyšev-Polynome $\check{C}_{2\nu}(x)$ ungünstig auf die Konstante $H(c,\varkappa)$ auswirkt. Wir folgen deshalb dem Vorgehen von HÄMMERLIN [1965,1966], um eine Verbesserung der Abschätzung (3.11) zu erreichen. HÄMMERLIN zeigte, daß für die Čebyšev-Polynome zweiter Art $U_{2\nu}(x)$ für $\nu = 1,..,80$ das erste Glied der Euler-McLaurinschen Entwicklung eine obere Schranke für den Fehler der Trapez-Regel liefert. Mit der Methode von HÄMMERLIN läßt sich zeigen, daß die Abschätzung

$$(3.22) \qquad \left| R_1(\check{C}_{2\nu}) \right| \leq \frac{h^2}{6} \cdot 4\cdot\nu^2$$

für diejenigen Schrittweiten $h = \frac{2}{n}$ richtig ist, für welche die Schrittzahl n den Ungleichungen

$$n^2 \leq \frac{4\cdot\nu^2 - 1}{3}$$

$$(3.23) \qquad n^2 \leq \frac{2\cdot(4\nu^2 - 16)\cdot(4\nu^2 - 9)}{\pi^2\cdot 7\cdot 9}$$

genügt. Für $1 \leq \nu \leq 35$ haben wir für diejenigen Schrittzahlen n, welche die Ungleichungen (3.23) nicht erfüllen, durch effektive Berechnung des Quadraturfehlers die Beziehung (3.22) ebenfalls zeigen können.[1] Verwenden wir nun in der Herleitung von Satz 3.1 die Abschätzung (3.22) statt

---

1) Die dazu notwendigen Rechnungen wurden auf der Rechenanlage CD 3200 des Rechenzentrums der Universität Tübingen durchgeführt.

(3.11), so erhalten wir folgendes Ergebnis:

Satz 3.2.

Unter den Voraussetzungen von Satz 3.1 gilt die Fehlerabschätzung

$$(3.24)\qquad \left|R_1(f)\right| \le \frac{2}{3}h^2 \frac{1 + C\left\{\frac{\varkappa^2(\varkappa^2+1)}{(\varkappa^2-1)^3} - \frac{1}{\varkappa^2} + \varepsilon(\varkappa)\right\}}{1 - C\cdot\frac{1}{\varkappa^2(\varkappa^4-1)}} E_1(f) \quad ,$$

wobei

$$(3.25)\qquad \varepsilon(\varkappa) := \sum_{\nu=36}^{\infty} \frac{\nu^2(4\nu^2-1)}{3\,\varkappa^{2\nu}}$$

gesetzt wurde. Für $\varkappa \ge 2$ gilt

$$(3.26)\qquad \varepsilon(\varkappa) < \frac{8}{3}\cdot\frac{36^4}{\varkappa^{72}} \quad .$$

In der Tabelle 2 haben wir für einige Werte von c und $\varkappa$ die zugehörigen Größen

$$(3.27)\qquad \tilde{H}(c,\varkappa) = \frac{1 + C\left\{\frac{\varkappa^2(\varkappa^2+1)}{(\varkappa^2-1)^3} - \frac{1}{\varkappa^2} + \varepsilon(\varkappa)\right\}}{1 - \frac{C}{\varkappa^2(\varkappa^4-1)}}$$

tabelliert.

Tabelle 2

| $\varkappa$ | $\tilde{H}(1,\varkappa)$ | $\tilde{H}(2,\varkappa)$ | $\tilde{H}(2\varkappa^2,\varkappa)$ |
|---|---|---|---|
| 2 | 1,5 | 2,05 | 2,6 |
| 4 | 1,02 | 1,1 | 1,3 |
| 10 | 1,000 5 | 1,000 9 | 1,09 |
| $\infty$ | 1 | 1 | 1 |

Bemerkung 3.3.

Die Werte $\tilde{H}(c,\varkappa)$ mit $c = 2\cdot\varkappa^2$ ergeben eine Vergleichsmöglichkeit, weil sie in (3.24) gerade die Fehlerschranken für $\check{C}_2(x)$ liefern. Denn nach Bernstein (vgl. MEINARDUS [1964], S. 85) gilt

$$(3.28) \qquad \sup_{z\in\mathcal{E}_\varkappa} \left|\check{C}_\nu(z)\right| \leq \varkappa^\nu \quad ,$$

also $c = 2\cdot\varkappa^2$ in dem betrachteten Fall. Die Werte $\tilde{H}(2\cdot\varkappa^2,\varkappa)$ stellen also die Vergröberungsfaktoren gegenüber dem exakten Fehler $R_1(\check{C}_2)$ dar. Für Funktionen mit rasch abfallenden Čebyšev-Koeffizienten ist c dann auch ungefähr gleich $2\cdot\varkappa^2$.

Bemerkung 3.4.

Falls $\alpha_2 = 0$ ist, gelten die Abschätzungen (3.21) und (3.24) nicht. Aus der Herleitung dieser Schranken folgt aber, falls $\alpha_{2m}$ der erste nichtverschwindende Koeffizient mit geradzahligem Index in der Entwicklung (3.2) ist, die Fehlerabschätzung

$$(3.29) \qquad \left|R_1(f)\right| \leq \hat{H}(c,\varkappa)\cdot h^2 E_{2m-1}(f) \quad , \text{ wobei}$$

$$(3.30) \qquad c := \frac{2\cdot M(\varkappa)}{|\alpha_{2m}|}$$

gesetzt wurde.

## § 4. Numerisch günstige Abschätzungen bei Vielpunktformeln

In diesem Paragraphen untersuchen wir Quadraturformeln, welche durch "Zusammenstückeln" einfacherer Formeln entstanden sind. Mit Hilfe der Bernsteinschen Ungleichung (2.11) vergleichen wir dann unsere Abschätzung (4.7) mit den üblichen Fehlerschranken. Erwartungsgemäß ergeben sich wieder die Vergröberungsfaktoren von Tabelle 1. Anschliessend gehen wir auf numerische Fragen ein und zeigen, daß man oft die Größe $E_n(f)$ durch die diskrete Approximationskonstante bezüglich gewissen Gitterpunkten ersetzen kann.

Wir gehen aus von Quadraturformeln des Typs

$$(4.1)\qquad \begin{cases} \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{m} a_k f(x_k) + R_n(f) \quad \text{mit} \\ R_n(P_n) = 0 \quad \text{für Polynome } P_n \text{ vom Grad} \leq n\,. \end{cases}$$

Das Intervall $[-1,1]$ sei in j Intervalle $I_\nu$ $(\nu = 0,1,\dots,j-1)$ der Länge h aufgeteilt, $I_\nu = [-1 + h\nu,\ -1 + h(\nu+1)]$. Wir setzen (Transformation von $[-1,1]$ auf $I_\nu$)

$$(4.2)\qquad t_{k,\nu} = \frac{hx_k + h(2\nu+1) - 2}{2} \qquad \begin{matrix}(k = 0,\dots,m)\\ (\nu = 0,\dots,j-1)\,.\end{matrix}$$

Diese Größen setzen wir statt $x_k$ in (4.1) ein und erhalten eine Quadraturformel, welche in $I_\nu$ für Polynome von höchstens n-tem Grad exakt ist:

$$(4.3)\qquad \begin{cases} \int_{-1+h\nu}^{-1+h(\nu+1)} f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{j} f(t_{k,\nu}) + R_{n,\nu}(f) \quad \text{mit} \\ R_{n,\nu}(f) = 0 \quad \text{für Polynome vom Grad} \leq n. \end{cases}$$

Durch "Zusammenstückeln" der Formeln vom Typ (4.3) für $\nu = 0,\dots,j-1$ erhält man eine Quadraturformel für das Intervall $[-1,1]$

$$(4.4)\qquad \begin{cases} \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{\nu=0}^{j-1} \sum_{k=0}^{m} \frac{a_k}{j} f(t_{k,\nu}) + R_n(f) \\ R_n(P_n) = 0 \quad \text{für Polynome } P_n \text{ vom Grad } P_n \leq n \\ \qquad\qquad \text{in jedem Intervall } I_\nu \ (\nu = 0,\dots,j-1). \end{cases}$$

Es sei $E_{n,\nu}(f)$ die algebraische Approximationskonstante bezüglich $I_\nu$:

$$(4.5)\qquad E_{n,\nu}(f) = \min_{\text{Grad } P_n \leq n} \sup_{x \in I_\nu} \left| f(x) - P_n(x) \right| .$$

Dann gilt folgendes Analogon zu Lemma 2.1.

Lemma 4.1.

Der Fehler $R_n(f)$ der Quadraturformel (4.4) läßt sich abschätzen durch

$$(4.6)\qquad \left| R_n(f) \right| \leq \frac{1}{j} \cdot \left\{ 2 + \sum_{k=0}^{m} |a_k| \right\} \cdot \sum_{\nu=0}^{j-1} E_{n,\nu}(f) .$$

Die Bernsteinsche Abschätzung (2.11) ergibt für $E_{n,\nu}(f)$ die Schranke

$$(4.7)\qquad E_{n,\nu}(f) \leq \frac{h^{n+1}}{2^{2n+1} \cdot (n+1)!} \cdot \sup_{x \in I_\nu} \left| f^{(n+1)}(x) \right| .$$

Dies bedeutet, daß die rechte Seite in (4.6) mit $h^{n+1}$ abnimmt und sich auch für die zusammengesetzten Quadraturformeln die Vergröberungsfaktoren von Tabelle 1 ergeben.

Durch Anwendung einer Methode von EHLICH-ZELLER [1964, 1965] zeigen wir, daß man die Approximationskonstante

$E_{n,\nu}(f)$ ohne allzu starke Vergröberung der Abschätzung (4.6) ersetzen kann durch die Abweichung $\varepsilon_\nu$ auf gewissen Gitterpunkten.

Lemma 4.2. (EHLICH-ZELLER [1965])

Das Polynom $P_r(x)$ sei vom Grad $P_r \leq r$ und erfülle in den Gitterpunkten $x_i = -1 + \frac{2i}{m}$ $(i = 0,\ldots,m)$ die Ungleichungen

$$(4.8) \qquad \left|P_r(x_i)\right| \leq \varepsilon .$$

Es sei

$$(4.9) \qquad \varrho := \frac{r^2\cdot(r^2-1)}{6\cdot m^2} \quad , \quad m > \frac{1}{\sin\frac{\pi}{r}\cdot\sin\frac{\pi}{2r}} .$$

Dann gilt die Abschätzung

$$(4.10) \qquad \left\|P_r\right\| \leq \frac{\varepsilon}{1-\frac{\varrho}{3}} .$$

Aus der Beweisführung von EHLICH-ZELLER folgt auch folgende Variante von Lemma 4.2.

Lemma 4.3. (EHLICH-ZELLER [1965])

Es sei $I_\nu$ ein abgeschlossenes Teilintervall von $[-1,1]$. Das Polynom $P_r(x)$ sei vom Grad $P_r \leq r$ und erfülle in den in $I_\nu$ gelegenen Gitterpunkten $x_i$ die Ungleichungen

$$(4.11) \qquad \left|P_r(x_i)\right| \leq \varepsilon_\nu \quad \text{für } x_i \in I_\nu .$$

Die Randpunkte von $I_\nu$ seien Gitterpunkte. Dann gilt mit $\varrho$ aus (4.9) die Abschätzung

$$(4.12) \qquad \max_{x\in I_\nu} \left|P_r(x)\right| \leq \frac{\varepsilon_\nu}{1-\frac{\varrho}{3}} .$$

Hieraus erhält man als Anwendung auf die Čebyšev-Approximation:

Lemma 4.4.

Es sei $P_{n,\nu}(x)$ ein Polynom von höchstens n-tem Grad, das in den in $I_\nu$ gelegenen Gitterpunkten $x_i$ den Ungleichungen

$$(4.13) \qquad \left| f(x_i) - P_{n,\nu}(x_i) \right| \leq \varepsilon_\nu \qquad (\nu = 0,1,\ldots,j-1)$$

genüge. Die Randpunkte von $I_\nu$ seien Gitterpunkte. Dann gilt für $r \geq n$

$$(4.14) \qquad \max_{x \in I_\nu} \left| f(x) - P_{n,\nu}(x) \right| \leq \left\{ \varepsilon_\nu + E_{r,\nu}(f) \right\} \frac{1}{1 - \frac{s}{3}} + E_{r,\nu}(f) \,.$$

Da das Polynom $P_{n,\nu}(x)$ i.a. nicht das Minimalpolynom für f bezüglich $I_\nu$ sein wird, gilt

$$(4.15) \qquad E_{n,\nu}(f) \leq \max_{x \in I_\nu} \left| f(x) - P_{n,\nu}(x) \right| \,.$$

Die Abschätzungen (4.14) und (4.15) setzen wir in (4.6) ein. Nach einfachen Umformungen erhalten wir folgende Fehlerabschätzung.

Satz 4.5.

Unter den Voraussetzungen von Lemma 4.4 gilt für die Quadraturformel (4.4) die Fehlerabschätzung

$$(4.16) \qquad \left| R_n(f) \right| \leq \frac{1}{j} \left\{ 2 + \sum_{k=0}^{m} |a_k| \right\} \cdot \left\{ \sum_{\nu=0}^{j-1} \frac{\varepsilon_\nu + E_{r,\nu}(f)}{1 - \frac{s}{3}} + E_{r,\nu}(f) \right\} \,.$$

Da $E_{r,\nu}(f)$ für wachsende r im Normalfall sehr schnell abnimmt, haben wir in (4.16) eine sehr günstige Fehlerschranke

gewonnen. Nach Wahl von r besteht die Hauptarbeit nur mehr darin, die Größen $\xi_\nu$ zu bestimmen, d.h. die Funktion f auf einer diskreten Punktmenge durch Polynome vom Grad $\leq n$ zu approximieren. Die Zahl der benötigten Gitterpunkte ist dabei über die Ungleichung (4.9) mit r verknüpft.

Um den Anschluß an bekannte Abschätzungsmethoden zu erhalten, gewinnen wir im folgenden Abschätzungen für r, falls f hinreichend oft differenzierbar ist. Wir betonen aber, daß die Ungleichung (4.16) völlig unabhängig von irgendwelchen Differenzierbarkeitseigenschaften der Funktion f ist. Die Fehlerschranke (4.16) vergrößern wir, indem wir $E_{r,\nu}(f)$ durch $E_r(f)$ ersetzen. Da $\sum E_{n,\nu}(f)$ auf Grund von (4.7) die Größenordnung von $|R_n(f)|$ hat, fordern wir

$$E_r(f) \leq E_{n,\nu}(f) . \tag{4.17}$$

In diesem Fall liefert auch die rechte Seite von (4.16) eine brauchbare Schranke für den Quadraturfehler. Wir gehen nun heuristisch vor und schätzen beide Seiten der Ungleichung (4.17) mit Hilfe der Bernsteinschen Ungleichung (2.11) nach oben ab. Nehmen wir nun an, daß die erhaltene Ungleichung

$$\frac{\left\|f^{(r+1)}\right\|}{2^r\,(r+1)!} \leq \frac{\left\|f^{(n+1)}\right\|\,h^{n+1}}{2^{2n+1}\,(n+1)!} \tag{4.18}$$

noch richtig ist, so ergibt sich für Funktionen, deren n-te Ableitung die Größenordnung von n! hat, die Abschätzung

$$2^{-r} \leq \frac{h^{n+1}}{2^{2n+1}} \qquad \text{oder} \tag{4.19}$$

$$r \geq 2n+1 - (n+1)\,\mathrm{ld}(h) . \tag{4.20}$$

In Tabelle 3 haben wir zu einigen Werten von h für die Trapez- und die Simpson-Regel die entsprechenden Werte von r und m zusammengestellt.

Tabelle 3

| j | h | Trapez-Regel | | | Simpson-Regel | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | r | m | $r^2/2$ | r | m | $r^2/2$ |
| 1 | 2 | 1 | 1 | 1 | 3 | 2 | 4 |
| 2 | 1 | 3 | 2 | 4 | 7 | 4 | 25 |
| 4 | $\frac{1}{2}$ | 5 | 4 | 12 | 11 | 8 | 60 |
| 8 | $\frac{1}{4}$ | 7 | 8 | 24 | 15 | 16 | 112 |
| 16 | $\frac{1}{8}$ | 9 | 16 | 40 | 19 | 32 | 180 |
| 32 | $\frac{1}{16}$ | 11 | 32 | 60 | 23 | 64 | 165 |
| 64 | $\frac{1}{32}$ | 13 | 64 | 85 | 27 | 128 | 365 |

Wie man aus der obigen Tabelle ersieht, reichen die Quadraturknoten für die Gitterabschätzungen nicht aus. Man benötigt bei der Trapez-Regel etwa zwei- bis dreimal soviel Gitterpunkte, als für die Quadratur herangezogen werden. Bei der Simpson-Regel braucht man noch mehr zusätzliche Gitterpunkte. Wir weisen aber darauf hin, daß die oben angegebenen Werte von r in vielen Fällen sehr pessimistisch sind. Denn wir hatten angenommen, daß die Ableitungen von f wie die Fakultät anwachsen. Dies ergab

$$(4.21) \qquad E_r(f) \leq 2^{-r} \qquad (r = 1,2,\ldots) .$$

Bei ganzen Funktionen nimmt dagegen $E_r(f)$ mit wachsendem r wesentlich rascher ab - schneller als jede Potenz. Dies bedeutet, daß wir auch kleinere Werte für r wählen können. So reicht bei der Exponentialfunktion und Schrittweite $h = 2^{-5}$ bei Verwendung der Trapez-Regel $r = 5$ (statt $r = 13$ ) aus (Simpson-Regel: $r = 9$ statt $r = 23$). Da also für hinreichend glatte Funktionen schon Polynome $P_r$ von niedrigem Grad ausreichen, ist die Abschätzung (4.16) für numerische Anwendungen gut geeignet. Die Hauptarbeit besteht dann darin, daß man f in den einzelnen Intervallen, in denen die Quadraturformel für Polynome exakt ist, durch Polynome von niedrigem Grad approximiert. Programmtechnisch läßt sich dies auf einfache Weise erreichen.

In manchen anderen Fällen, falls etwa der Anfang einer Reihenentwicklung von f zur Verfügung steht, kann es günstiger sein, f im ganzen Intervall $[-1,1]$ durch ein Polynom von hohem Grad zu approximieren und anschließend den Fehler dieses Polynoms zu ermitteln.

Satz 4.6.

Es sei $E_r(f)$ für ein $r \geq n$ bekannt. $P_r$ sei das zugehörige Polynom bester Approximation für f. Dann gilt

$$(4.22) \qquad \left| \left|R_n(P_r)\right| - \left|R_n(f - P_r)\right| \right| \leq \left|R_n(f)\right| \leq \left|R_n(P_r)\right| + \left\{2 + \sum_{k=0}^{m} |a_k|\right\} E_r(f) .$$

Der Beweis folgt mit Satz 2.1 aus der Identität

$$(4.23) \qquad R_n(f) = R_n(f-P_r) + R_n(P_r) .$$

Da ein Polynom r-ten Grades schon durch r+1 Punkte bestimmt ist, haben wir in der Abschätzung (4.22) und auch in den folgenden Fehlerschranken dieses Paragraphen den Quadraturfehler sozusagen zerlegt in einen diskreten Anteil $R_n(P_r)$ und einen kontinuierlichen Teil, welcher die Approximationskonstante $E_r(f)$ enthält. Dies wird besonders deutlich, wenn man $P_r$ in Lagrange-Form darstellt

$$(4.24) \qquad P_r(x) = \sum_{\mu=0}^{r} f(x_\mu) \cdot l_\mu(x) \quad ,$$

wobei $l_\mu(x)$ die Lagrange-Grundfunktionen über gewisse Knoten seien. Dann nimmt nämlich die rechte Seite von (4.22) die Gestalt

$$(4.25) \qquad \left| R_n(f) \right| \leq \left| \sum_{\mu=0}^{r} f(x_\mu) \cdot R_n(l_\mu) \right| + \left\{ 2 + \sum_{k=0}^{m} |a_k| \right\} \cdot E_r(f)$$

an.

Die Gewinnung des Minimalpolynoms $P_r$ für f wird meist Schwierigkeiten bereiten. Durch Anwendung von Lemma 4.2 können wir aber $P_r$ durch ein einfacher zu gewinnendes Polynom ersetzen.

Satz 4.7.

Unter den Voraussetzungen von Lemma 4.2 gilt für die Quadraturformel (4.1) die Fehlerabschätzung

$$(4.26) \qquad \left| R_n(f) \right| \leq 2 \cdot \left\{ \varepsilon + E_r(f) \right\} \cdot \frac{1}{1 - \frac{\varepsilon}{3}} + 2 \cdot E_r(f) + \varepsilon \cdot \sum_{k=0}^{m} |a_k| + \left| R_n(P_r) \right| .$$

Der Beweis folgt mit (4.10) aus (4.23).

Bemerkung 4.8.

Falls man das Polynom $P_r$ durch Interpolation gewinnt, gilt statt (4.26) auch die folgende Abschätzung:

$$(4.27) \qquad |R_n(f)| \leq \left\{2 + \sum_{k=0}^{m} |a_k|\right\} \cdot \left\{1 + \lambda_r\right\} \cdot E_r(f) + \\ + |R_n(P_r)| \quad ,$$

wo die Größen $\lambda_r$ die zugehörigen Lebesgue-Konstanten sind. Wie SCHÖNHAGE [1961] zeigte, wachsen im äquidistanten Fall die Lebesgue-Konstanten sehr schnell an. Dann scheidet die Abschätzung (4.27) für praktische Anwendungen aus. In diesem Fall verwendet man (4.26), während hingegen (4.27) bei Čebyšev-Interpolation günstig ist.

## § 5. Verwendung der Einflußfunktion

Ableitungsfreie Fehlerschranken lassen sich auch mit Hilfe der "Einflußfunktion" gewinnen. Zu diesem Zweck betrachten wir im folgenden (n+1)-mal stetig differenzierbare Funktionen f(x). Unter Verwendung der Taylorentwicklung mit Restglied in der Integralform

$$(5.1) \qquad f(x) = \sum_{\nu=0}^{n} \frac{1}{\nu!} f^{(\nu)}(-1)\cdot(x+1)^{\nu} + \frac{1}{n!}\int_{-1}^{x} f^{(n+1)}(s)\cdot(x-s)^{n}\,ds$$

kann man zeigen, daß sich der Quadraturfehler

$$(5.2) \qquad \begin{cases} R_n(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - \sum_{k=0}^{m} a_k \cdot f(x_k) & \text{mit} \\ R_n(P) = 0 & \text{für Polynome P vom Grad } P \leq n \end{cases}$$

darstellen läßt in der Form

$$(5.3) \qquad R_n(f) = \frac{1}{n!}\cdot\int_{-1}^{1} f^{(n+1)}(s)\cdot G(s)\,ds \quad .$$

Die nur von der Quadraturformel $R_n$, nicht aber von f abhängende Funktion G(s) bezeichnet man als Einflußfunktion. Diese hat für die Simpson-Regel die Form

$$(5.4) \qquad G(s) = \begin{cases} -(1-s)^3\cdot\frac{1+3s}{12} & \text{für } 0 \leq s \leq 1 \\ -(1+s)^3\cdot\frac{1-3s}{12} & \text{für } -1 \leq s \leq 0 \end{cases}$$

(vgl. HILDEBRAND [1956], S. 164). Auch andere stetige Linearformen auf dem Raum der (n+1)-mal differenzierbaren Funktionen, welche für Polynome vom Grad ≤n verschwinden, lassen sich auf die Gestalt (5.3) bringen, wobei G nur von dem betrachteten Funktional abhängt. Die diskrete Approximationskonstante

$L_n(f)$ bezüglich n+2 verschiedener Punkte aus $[-1,1]$ ist von diesem Typ. Für die Čebyšev-Knoten $x_k = -\cos\frac{k\pi}{n+1}$ $(k = 0,1,\ldots,n+1)$ läßt sich $L_n(f)$ darstellen in der Form (vgl. MEINARDUS [1964], S. 74)

$$(5.5)\qquad L_n(f) = \frac{1}{2n+2}\left\{f(1) + 2\cdot\sum_{k=1}^{n}(-1)^k\cdot f(x_k) + (-1)^{n+1}f(-1)\right\}.$$

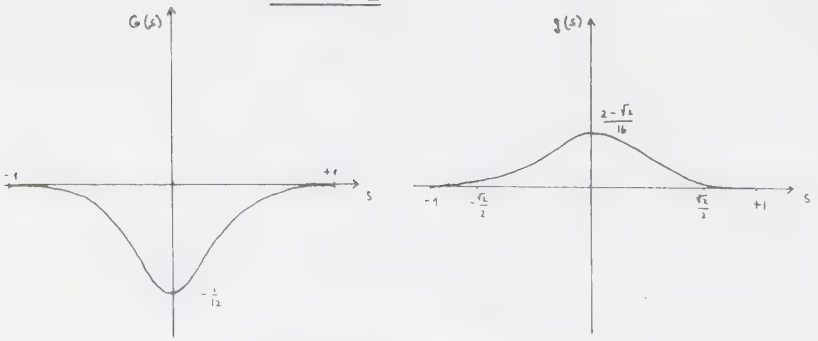
Hieraus folgt mit der Taylorentwicklung von f(x)

$$(5.6)\qquad L_n(f) = \frac{1}{n!}\cdot\int_{-1}^{1} f^{(n+1)}(s)\cdot g(s)\,ds \quad .$$

Die nur von $L_n$, nicht aber von f abhängende Einflußfunktion g(s) hat etwa für $n = 3$ (passend zur Simpsonregel) die Form

$$(5.7)\qquad g(s) = \frac{1}{8}\cdot\begin{cases} -\left(\frac{\sqrt{2}}{2} - s\right)^3 + (1-s)^3 & \text{für } 0 \le s \le \frac{\sqrt{2}}{2} \\ (1-s)^3 & \text{für } \frac{\sqrt{2}}{2} \le s \le 1 \\ \text{symmetrisch zu } s = 0 \quad . \end{cases}$$

Skizze 2




Für die Simpson-Regel läßt sich numerisch die Beziehung

(5.8) $\frac{4}{3} g(s) \leq -G(s) \leq \frac{8}{3} g(s)$ für $-1 \leq s \leq 1$

verifizieren. Für Funktionen mit nicht-negativer vierter Ableitung folgt hieraus mit Hilfe des verallgemeinerten Mittelwertsatzes der Integralrechnung

(5.9) $\frac{4}{3} L_3(f) \leq -R_3(f) \leq \frac{8}{3} L_3(f)$ .

Wir fassen diese Ergebnisse zusammen in folgendem Satz.

Satz 5.1.

Es sei $f^{(n+1)}(x) \geqslant 0$ bzw. $\leqslant 0$ in $[-1,1]$. Dann gilt für den Fehler $R_3(f)$ der Simpson-Regel die Abschätzung

(5.10) $0 \leq \frac{4}{3} L_3(f) \leq -R_3(f) \leq \frac{8}{3} L_3(f)$

bzw.

(5.11) $\frac{8}{3} L_3(f) \leq -R_3(f) \leq \frac{4}{3} L_3(f) \leq 0$ .

Korollar 5.2.

Da $|L_n(f)| \leq E_n(f)$ ist, läßt sich die Abschätzung für die Simpson-Regel

(5.12) $|R_3(f)| \leq 4 \cdot E_3(f)$

in den Fällen, wo $f^{(4)}(x)$ das Vorzeichen nicht wechselt, verbessern zu

(5.13) $|R_3(f)| \leq \frac{8}{3} E_3(f)$ .

Falls $f^{(n+1)}(s)$ das Vorzeichen in $[-1,1]$ wechselt, kann man versuchen, eine Konstante $c \gtrless 0$ zu bestimmen mit

(5.14) $f^{(n+1)}(s) + c \geqslant 0$ bzw.

(5.15) $f^{(n+1)}(s) + c \leqslant 0$ für $-1 \leq s \leq 1$ .

Satz 5.3.

Es gelte die Ungleichung (5.14). Dann läßt sich der Fehler $R_3(f)$ der Simpson-Regel abschätzen in der Form

$$(5.16)\quad \frac{4}{3}\cdot L_3(f) - \frac{c}{10\cdot 4!} \leq -R_3(f) \leq \frac{8}{3}\cdot L_3(f) + \frac{c}{15\cdot 4!}$$

Beweis:

Die Funktion $\tilde{f}(x) = f(x) + c\cdot\frac{\check{C}_4(x)}{8\cdot 4!}$ erfüllt die Ungleichung (5.14). Nach Satz 5.1 folgt

$$(5.17)\quad \frac{4}{3}\cdot L_3(\tilde{f}) \leq -R_3(\tilde{f}) \leq \frac{8}{3}\cdot L_3(\tilde{f})$$

oder

$$(5.18)\quad \frac{4}{3}\cdot L_3(f) + \frac{4}{3}\cdot c\cdot\frac{L_3(\check{C}_4)}{8\cdot 4!} \leq -R_3(f) - c\cdot\frac{R_3(\check{C}_4)}{8\cdot 4!}$$

$$\leq \frac{8}{3}\cdot L_3(f) + \frac{8}{3}\,c\cdot\frac{L_3(\check{C}_4)}{8\cdot 4!}\quad .$$

Wegen $L_3(\check{C}_4) = 1$ und $R_3(\check{C}_4) = -\frac{32}{15}$ folgt hieraus die Behauptung (5.16).

Für $f(x) = \cos x$ etwa liefert die Ungleichung (5.16) mit $c = 1$

$$(5.19)\quad 0{,}0027 \leq -R_3(f) \leq 0{,}0163\ ,$$

während die übliche Abschätzung mit Hilfe der vierten Ableitung die obere Schranke 0,011 liefert. In diesem Beispiel erhält man aus (5.16) eine ungünstigere Fehlerschranke als mit den geläufigen Abschätzungen. Unsere Abschätzungsmethode hat aber den Vorteil, daß sie vergleichsweise unempfindlich gegenüber der Wahl von c ist. Bei dem oben betrachteten

Beispiel $f(x) = \cos x$ erhält man mit $c = 2$ die Abschätzung

$$(5.20) \qquad -0{,}0013 \leq -R_3(f) \leq 0{,}0193 \ ,$$

während sich die Schranke 0,011 verdoppelt. Ist also etwa eine Schranke

$$(5.21) \qquad \left\| f^{(n+1)} \right\| \leq c$$

bekannt, so wird man statt der Abschätzung

$$(5.22) \qquad \left| R_3(f) \right| \leq \frac{c}{90}$$

die Abschätzung (5.16) verwenden, da hier c mit einem wesentlich kleineren Faktor verknüpft ist.

Bemerkung 5.6.

Unter der starken Voraussetzung, daß $f^{(4)}(x)$ das Vorzeichen nicht wechselt, sind schon seit längerem einfach gebaute Fehlerabschätzungen bekannt. So findet man etwa bei KRYLOV [1962, S. 225, Theorem 5] eine Darstellung des Fehlers der Simpson-Regel, die nach kleinen Umformungen die Gestalt

$$(5.23) \qquad R_3(f) = -\theta \cdot \frac{h^4}{72} \left[ f^{(3)}(1) - f^{(3)}(-1) \right] \qquad (0 < \theta < 1)$$

annimmt. Diese Abschätzung hat aber gegenüber (5.16) den Nachteil, daß man die dritte Ableitung von $f(x)$ in den Intervallenden kennen muß.

Bemerkung 5.7.

Nach PASZKOWSKI (vgl. MELNARDUS [1964], S. 95) lassen sich unter der oben gemachten Annahme, daß $f^{(4)}(x)$ das Vorzeichen

in $[-1,1]$ nicht wechselt, die Alternantenpunkte von f in der folgenden Weise eingrenzen:

a) Die Intervallenden -1 und +1 sind Alternantenpunkte.

b) Die restlichen drei Alternantenpunkte liegen in den Intervallen $\left[-1,-\frac{1}{2}\right]$, $\left[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right]$, $\left[\frac{1}{2},1\right]$.

Bei $L_3(f)$ verwenden wir die Punkte -1 und +1 - dies sind die unter a) genannten Punkte - und $-\frac{\sqrt{2}}{2}$, $0$, $\frac{\sqrt{2}}{2}$, also jeweils etwa die Mittelpunkte der unter b) angegebenen Intervalle. Daraus folgt, daß $\left|L_3(f)\right|$ ungefähr gleich $E_3(f)$ ist und sich also $\left|R_3(f)\right|$ in der Größenordnung durch $4\left|L_3(f)\right|$ abschätzen läßt. Beachtet man außerdem, daß der Faktor 4 sehr pessimistisch ist, so erhält man eine plausible Erklärung für die Abschätzung (5.9).

Für die Trapez-Regel

$$(5.24) \qquad R_1(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - \left\{f(1) + f(-1)\right\}$$

und die zugehörige diskrete Approximationskonstante

$$(5.25) \qquad L_1(f) = \frac{1}{4}\cdot\left\{f(1) - 2\cdot f(0) + f(-1)\right\}$$

erhält man die beiden Einflußfunktionen

$$(5.26) \qquad G(s) = -\frac{s^2-1}{2} \qquad \text{für } -1 \leq s \leq 1\,,$$

$$(5.27) \qquad g(s) = \begin{cases} \frac{s+1}{4} & \text{für } -1 \leq s \leq 0 \\ \frac{1-s}{4} & \text{für } 0 \leq s \leq 1\,. \end{cases}$$

Aus $\frac{G(s)}{g(s)} = 2(s+1)$ für $0 \leq s \leq 1$ bzw. $= 2(1-s)$

für $-1 \leq s \leq 0$ folgt die Beziehung

$$2\,g(s) \leq -G(s) \leq 4\,g(s)\,. \tag{5.28}$$

Satz 5.6.

Es sei $f''(x) \geq 0$ bzw. $\leq 0$ in $[-1,1]$. Dann gilt

$$2\cdot L_1(f) \leq -R_1(f) \leq 4\cdot L_1(f) \quad \text{bzw.} \tag{5.29}$$

$$4\cdot L_1(f) \leq -R_1(f) \leq 2\cdot L_1(f)\,. \tag{5.30}$$

Satz 5.7.

Es sei $f''(x) + c \geq 0$ in $[-1,1]$. Dann gilt die Fehlerabschätzung

$$2\cdot L_1(f) - \frac{c}{6} \leq -R_1(f) \leq 4\cdot L_1(f) + \frac{c}{3}\,. \tag{5.31}$$

Bemerkung 5.8.

Wie in Bemerkung 5.6 erhält man nach KRYLOV [1962, S. 217, Theorem 2] unter der Voraussetzung $f'' \geq 0$ die Fehlerabschätzung

$$R_1(f) = -\theta\cdot\frac{h^2}{8}\cdot\left[f'(1) - f'(-1)\right] \qquad (0 < \theta < 1). \tag{5.32}$$

## Kapitel II. Untersuchung einiger spezieller Quadraturformeln

In den bisherigen Abschätzungen haben wir noch wenig die spezielle Struktur der verschiedenen Quadraturformeln berücksichtigt. In diesem Kapitel wollen wir nun noch einige Quadraturmethoden untersuchen, welche genaueres Eingehen auf die besondere Gestalt der Quadraturformel erfordern. Wir werden insbesondere Abschätzungen für die Formeln vom Gauß-Typ und die Verfahren von Clenshaw-Curtis und von Romberg gewinnen.

### § 6. Formeln von Gauß, Radau und Lobatto

Es sei $p(x)$ eine nichtnegative Gewichtsfunktion im Intervall $[-1,1]$. Die Quadraturformel

$$(6.1) \qquad \int_{-1}^{1} p(x) \cdot f(x)\, dx = \sum_{k=0}^{n} f(x_k^{(n)}) \cdot a_k^{(n)} + R_n(f)$$

hat den Genauigkeitsgrad $2n+1$, falls die Knoten $x_k^{(n)}$ die Nullstellen des Orthogonalpolynoms $p_n(x)$ zur Belegung $p(x)$ sind und die Gewichte $a_k^{(n)}$ durch Integration der zu diesen Knoten gehörenden Lagrange-Grundfunktionen bestimmt werden (vgl. KRYLOV [1962], S. 100 ff.). Für solche Gauß-Formeln sind schon länger ableitungsfreie Fehlerschranken bekannt, falls $f$ in einem das Intervall $[-1,1]$ enthaltenden Gebiet der komplexen Ebene holomorph ist. So gewinnen DAVIS [1953, 1962] und DAVIS-RABINOWITZ [1954] derartige Schranken mit Hilfe von $L_2$-Abschätzungen (vgl. auch STROUD-SECREST [1966], S. 66 ff.). McNAMEE [1964] stellt den Fehler einer Gauß-Formel als komplexes Integral dar und gewinnt so ableitungsfreie Fehlerschranken. STENGER [1966] verfeinert diese

Abschätzungen dadurch, daß er Reihenentwicklungen und Schranken für $E_n(f)$ verwendet.

Wir gewinnen Fehlerschranken mit Hilfe von Satz 2.1 (vgl. auch STROUD [1966]). Da die Gewichte $a_k^{(n)}$ stets positiv sind, gilt nach Satz 2.1

$$(6.2) \qquad |R_n(f)| \leq 4 \cdot E_{2n+1}(f) \ .$$

Da sich die Gauß-Formeln durch hohen Genauigkeitsgrad auszeichnen, ist zu erwarten, daß die Abschätzung (6.2) sehr günstig ist. Für einige der bekanntesten Formeln werden wir diese Vermutung verifizieren, indem wir in (6.2) mit Hilfe der Ungleichung von Bernstein (2.11) die Approximationskonstante abschätzen und den Koeffizienten von $f^{(2n+2)}(x)$ vergleichen mit dem Faktor vor der Ableitung in den üblichen Abschätzungen.

a) Gauß-Legendre-Formel mit $p(x) = 1$

Die übliche Theorie liefert die Fehlerabschätzung (vgl. KRYLOV [1962], S. 109)

$$(6.3) \qquad R_n(f) = \frac{2^{2n+3}}{(2n+3)!} \cdot \left[\frac{[(n+1)!]^2}{(2n+2)!}\right]^2 \cdot f^{(2n+2)}(\xi) \ .$$

Mit Hilfe der Bernsteinschen Ungleichung (2.11) erhalten wir aus (6.2)

$$(6.4) \qquad |R_n(f)| \leq \frac{\|f^{(2n+2)}\|}{2^{2n-1}\,(2n+2)!} \ .$$

Mit Hilfe der Stirlingschen Formel

$$(6.5) \qquad n! = n^n e^{-n} \sqrt{2\pi n}\, e^{\frac{\vartheta_n}{12n}} \qquad (0 \leq \vartheta_n \leq 1)$$

erhalten wir für den Quotienten $Q(n)$ der Koeffizienten in (6.3) und (6.4) die Abschätzung

$$(6.6) \qquad Q(n) \leq \frac{(2n+3)\,(2n+1)^2}{n\,(n+1)^2} \cdot \frac{1}{\pi} \cdot e^{\frac{1}{12n}} \; .$$

Hieraus folgt

$$(6.7) \qquad Q(n) < 3 \quad \text{für} \quad n \geq 4 \quad \text{und}$$

$$(6.8) \qquad Q(n) \longrightarrow \frac{8}{\pi} \quad \text{für} \quad n \longrightarrow \infty \; .$$

Wie man leicht sieht, gilt (6.7) auch für $n = 1,2,3$. Die Gauß-Legendre-Formel läßt sich also recht günstig mit Hilfe der Approximationskonstanten abschätzen.

b) Gauß-Čebyšev-Formel mit $p(x) = \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}}$

Man kennt hier die Fehlerabschätzung (vgl. KRYLOV [1962], S. 115)

$$(6.9) \qquad R_n(f) = \frac{\pi}{2^{2n+1}} \cdot \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \; .$$

Damit erhalten wir

$$(6.10) \qquad Q(n) = \frac{4}{2^{2n+1} \cdot (2n+2)!} \cdot \frac{2^{2n+1} \cdot (2n+2)!}{\pi}$$

$$= \frac{4}{\pi} \; .$$

Hier ist die Abschätzung mit Hilfe der Größe $E_n(f)$ noch günstiger als bei der Gauß-Legendre-Formel. Dies ist nicht sehr erstaunlich, da bei diesem Quadraturverfahren die Nullstellen der Čebyšev-Polynome als Knoten gewählt werden.

c) Gauß-Formel mit $p(x) = \sqrt{1 - x^2}$

Für dieses Verfahren ist die Fehlerabschätzung

$$(6.11) \qquad R_n(f) = \frac{\pi}{2^{2n+2}} \cdot \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!}$$

bekannt (vgl. KRYLOV [1962], S. 115). Hiermit erhält man

$$(6.12) \qquad Q(n) = \frac{4}{2^{2n+1} \cdot (2n+2)!} \cdot \frac{2^{2n+2} \cdot (2n+2)!}{\pi}$$

$$= \frac{8}{\pi} .$$

Bei manchen Anwendungen der numerischen Integration liegt es nahe, gewisse "natürliche" Knoten zu verwenden, etwa bei der Lösung von Randwertaufgaben die Endpunkte des Intervalls. Von Radau und Lobatto stammen Modifikationen der Gauß-Formeln, welche die Intervallenden als Knoten enthalten (vgl. KRYLOV [1962], S. 166 ff.).

d) Radau-Formeln

Radau untersuchte die Frage, ob sich die Formeln von Gauß-Legendre dahingehend modifizieren lassen, daß stets einer der Randpunkte des Intervalls (o.B.d.A. $x_o = 1$) Quadraturknoten ist und sich noch n Knoten $x_i^{(n)}$ ($i = 1,2,\ldots,n$) und n+1 Gewichte $a_i^{(n)}$ ($i = o,1,\ldots,n$) angeben lassen derart, daß die Quadraturformel

$$(6.13) \qquad \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = a_o^{(n)} \cdot f(-1) + \sum_{K=1}^{n} a_k^{(n)} \cdot f(x_k^{(n)}) + R_n(f)$$

exakt für Polynome vom Grad $\leq 2n$ ist. Dies ist in der Tat der Fall, wenn man als Knoten $x_k^{(n)}$ die Nullstellen des Jacobi-Polynoms $P_n^{(0,1)}$ wählt und

$$(6.14)\qquad \begin{aligned} a_0^{(n)} &= \frac{2}{(n+1)^2} \quad , \\ a_k^{(n)} &= \frac{4}{(1+x_i)\cdot(1-x_i^2)\cdot(P_n^{(0,1)\prime}(x_i))^2} \quad \text{für } i=1,..,n \end{aligned}$$

setzt. Dann gilt (vgl. KRYLOV [1962], S. 169)

$$(6.15)\qquad R_n(f) = \frac{2}{n+1}\cdot\left[\frac{2^n\cdot n!\cdot(n+1)!}{(2n+1)!}\right]^2\cdot\frac{f^{(2n+1)}(\xi)}{(2n+1)!} \quad .$$

Wegen (6.14) sind die Gewichte $a_k^{(n)}$ alle positiv. Nach Satz 2.1 gilt also

$$(6.16)\qquad |R_n(f)| \leq 4\cdot E_{2n}(f) \quad .$$

Für den Quotienten $Q(n)$ erhalten wir in diesem Fall

$$(6.17)\qquad Q(n) = \frac{4}{2^{2n}\cdot(2n+1)!}\cdot\frac{n+1}{2}\cdot\left[\frac{(2n+1)!}{2^n\cdot n!\cdot(n+1)!}\right]^2\cdot(2n+1)! \quad ,$$

woraus nach der Stirlingschen Formel (6.5) folgt

$$(6.18)\qquad Q(n) \longrightarrow \frac{8}{\pi} \qquad \text{für } n\longrightarrow\infty \quad .$$

Formeln von Lobatto

Die Formeln von Lobatto enthalten beide Intervallenden als Knoten:

$$(6.19)\qquad \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = a_0^{(n)}\cdot f(-1) + \sum_{k=1}^{n} a_k^{(n)}\cdot f(x_k^{(n)}) + a_{n+1}^{(n)}\cdot f(1) + R_n(f) \quad .$$

Hier erzielt man den größtmöglichen Genauigkeitsgrad 2n+1 mit den Gewichten

$$a_0^{(n)} = a_{n+1}^{(n)} = \frac{2}{(n+1)\cdot(n+2)} ,$$

(6.20)

$$a_k^{(n)} = \frac{8\cdot(n+1)}{(n+2)\cdot(1-x_k^{(n)2})^2\cdot\left[P_n^{(1,1)'}(x_k^{(n)})\right]^2}$$

und den Nullstellen $x_k^{(n)}$ des Jacobi-Polynoms $P_n^{(1,1)}$ als Knoten. Es gilt (vgl. KRYLOV [1962], S. 172)

$$(6.21) \qquad R_n(f) = \frac{8\cdot(n+1)}{(2n+3)\cdot(n+2)}\cdot\left[\frac{2^n\cdot n!\cdot(n+2)!}{(2n+2)!}\right]^2\cdot\frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} .$$

Wegen (6.20) sind die Gewichte $a_k^{(n)}$ alle positiv, woraus mit Satz 2.1 folgt

$$(6.22) \qquad \left|R_n(f)\right| \leq 4\cdot E_{2n+1}(f) .$$

Für $Q(n)$ folgt mit der Stirlingschen Formel (6.5) auch hier

$$(6.23) \qquad Q(n) \longrightarrow \frac{8}{\pi} \quad \text{für } n \longrightarrow \infty .$$

## § 7. Das Verfahren von Clenshaw-Curtis

Von CLENSHAW-CURTIS [1960] wurde für die numerische Integration ein Verfahren vorgeschlagen, welches man als Interpolationsquadraturverfahren über die Čebyšev-Knoten $x_i^{(n)} = \cos \frac{i\pi}{n}$ $(i = 0,\ldots,n)$ deuten kann. Man verwendet folgendes Quadraturverfahren (vgl. FRASER-WILSON [1966])

$$(7.1) \qquad \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \int_{-1}^{1} L_n(f;x)\,dx + R_n(f) \quad , \text{ wobei}$$

$$(7.2) \qquad L_n(f;x) = {\sum_{i=0}^{n}}'' \, b_i \cdot \check{C}_i(x) \quad \text{mit}$$

$$(7.3) \qquad b_i = \frac{2}{n} \cdot {\sum_{j=0}^{n}}'' \, f(x_j^{(n)}) \cdot \check{C}_i(x_j^{(n)})$$

gesetzt ist. Die beiden Striche am Summenzeichen bedeuten, daß der erste und letzte Summand zu halbieren ist. Durch Integration von (7.1) erhält man

$$(7.4) \qquad R_n(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - {\sum_{j=0}^{n}}'' \, a_j^{(n)} \cdot f(x_j^{(n)}) \quad ,$$

wobei für gerades n

$$(7.5) \qquad a_j^{(n)} = \frac{2}{n} {\sum_{i=0}^{n}}'' \, \frac{(-2) \cdot \check{C}_{2i}(x_j^{(n)})}{4 \cdot i^2 - 1}$$

ist. Wie IMHOF [1963] zeigte, sind die Gewichte $a_j^{(n)}$ nichtnegativ. Nach Satz 2.1 gilt also eine Abschätzung

$$(7.6) \qquad |R_n(f)| \leq 4 \cdot E_n(f)$$

und aus Symmetriegründen für gerades n sogar

$$(7.7) \qquad |R_n(f)| \leq 4 \cdot E_{n-1}(f) \quad .$$

Eine Standardabschätzung (FRASER-WILSON [1966]) liefert

$$(7.8) \qquad \left|R_n(f)\right| \leq \frac{\left\|f^{(n+1)}\right\|}{2^{n-1}\cdot(n+1)!} \quad .$$

Vergleich von (7.6) und (7.8) ergibt eine Vergröberung um einen Faktor 2 .

In manchen Fällen ist aber möglicherweise die Abschätzung (7.7) zu grob. Man wird deshalb, wie es in Paragraph 4 für die Newton-Cotes-Formeln vorgeschlagen wurde, die Funktion f durch ein Polynom höheren Grades approximieren und dann den Fehler dieses Polynoms abschätzen. Hier eignet sich besonders das Interpolationspolynom 2n-ten Grades über die Knoten $x_i^{(2n)} = \cos\frac{i\pi}{2n}$ $(i = 0,1,..,2n)$, da man, wie FRASER-WILSON [1966] vorgeschlagen haben, im Normalfall von $n = 1$ ausgehend iterativ n verdoppeln wird, bis eine hinreichende Genauigkeit erzielt ist. Es gilt dann

$$(7.9) \qquad \begin{aligned} R_n(f) &= R_{2n}(f) + R_n(f) - R_{2n}(f) \\ &= R_{2n}(f) + \int_{-1}^{+1} \left\{L_{2n}(f;x) - L_n(f;x)\right\}\, dx \end{aligned}$$

oder auf Grund der besonderen Bauart der Quadraturformel

$$(7.10) \qquad R_n(f) = R_{2n}(f) + R_n(L_{2n}) \quad .$$

Hieraus folgt

$$(7.11) \qquad \left|R_n(f)\right| \leq 4\cdot E_{2n+1}(f) + \left|R_n(L_{2n})\right| \quad .$$

Durch Einsetzen erhält man

$$(7.12) \qquad \left|R_n(f)\right| \leq 4\cdot E_{2n+1}(f) + \left|\sum_{j=0}^{2n}{}'' a_j^{(2n)} f(x_j^{(2n)}) - \sum_{j=0}^{n}{}'' a_j^{(n)} f(x_j^{(n)})\right| \quad .$$

Wir setzen

$$(7.13)\qquad \alpha_j^{(2n)} = \begin{cases} a_j^{(2n)} - a_j^{(n)} & \text{für } j = 0,2,4,\ldots,2n \\ a_j^{(n)} & \text{für } j = 1,3,\ldots,2n-1 \end{cases}$$

und erhalten aus (7.12) die Abschätzung

$$(7.14)\qquad |R_n(f)| \leq 4 \cdot E_{2n+1}(f) + \left| \sum_{j=0}^{2n}{}'' \alpha_j^{(2n)} \cdot f(x_j^{(2n)}) \right| .$$

Wenn man beginnend mit $n = 1$ sukzessiv $n$ verdoppelt, stellt der Term $\sum_{j=0}^{2n}{}'' \alpha_j^{(2n)} \cdot f(x_j^{(2n)})$ gerade die Differenz zweier aufeinanderfolgender Näherungen dar. Die Abschätzung (7.14) liefert in diesem Fall gleichzeitig zwei Fehlerschranken. Denn der Term $4 \cdot E_{2n+1}(f) + |R_n(L_{2n})|$ stellt eine Schranke für $|R_n(f)|$ dar, während der Term $4 \cdot E_{2n+1}(f)$ eine Abschätzung für $|R_{2n}(f)|$ liefert. Wenn also in Anwendungen etwa eine bestimmte Genauigkeit vorgeschrieben ist, erhält man bei jedem Schritt einen Hinweis dafür, ob noch ein weiterer notwendig ist.

Während $E_{n+1}(f)$ möglicherweise noch groß im Vergleich zu $|R_n(f)|$ ist, hat $E_{2n+1}(f)$ sicher schon die Größenordnung des Quadraturfehlers. Denn bei den sehr genauen Gauß-Formeln reicht bei n+1 Punkten auch schon $E_{2n+1}(f)$ aus. Die Abschätzung (7.14) braucht also nicht verbessert zu werden.

## § 8. Fehlerabschätzung für das Verfahren von Romberg

Von ROMBERG (vgl. etwa BAUER-RUTISHAUSER-STIEFEL [1963]) wurde folgendes Verfahren zur numerischen Quadratur vorgeschlagen. Man geht aus von einem festen Intervall $[a,b]$, o.B.d.A. vom Intervall $[-1,1]$, und teilt es im k-ten Schritt in $2^k$ Teilintervalle der Länge $h = 2^{-k+1}$ auf. Die zugehörigen Näherungswerte, welche die Trapez-Regel liefert, seien mit $T_0^{(k)}(f)$ bezeichnet. Ausgehend von den Größen $T_0^{(k)}(f)$ definiert man rekursiv

$$(8.1) \qquad T_m^{(k)}(f) = \frac{4^m\, T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1} \qquad \text{für } m = 1,2,\ldots$$

Nach BAUER-RUTISHAUSER-STIEFEL [1963] läßt sich $T_m^{(k)}(f)$ auch auf die Form

$$(8.2) \qquad T_m^{(k)}(f) = h \cdot \sum_{j=0}^{2^{m+k}} d_j^{(m)} \cdot f(-1+jh)$$

bringen. Es sei

$$(8.3) \qquad R_m^{(k)}(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - T_m^{(k)}(f) \quad .$$

Dann gilt

$$(8.4) \qquad R_m^{(k)}(p_{2m+1}) = 0 \quad ,$$

falls $p_{2m+1}(x)$ ein Polynom vom Grad $\leq 2m+1$ ist. Die Gewichte $d_j^{(m)}$ sind alle positiv. Nach Satz 2.1 läßt sich der Quadraturfehler also abschätzen in der folgenden Weise:

$$(8.5) \qquad \left| R_m^{(k)}(f) \right| \leq 4 \cdot E_{2m+1}(f).$$

Nach BAUER-RUTISHAUSER-STIEFEL [1963] gilt mit den Bernoullischen Zahlen $B_{2m}$

$$(8.6) \qquad R_m^{(k)}(f) = 2^{2m+2} \cdot \frac{4^{-k(m+1)} \cdot B_{2m+2}}{2^{m(m+1)} \cdot (2m+2)!} f^{(2m+2)}(\xi) .$$

(Der Faktor $2^{2m+2}$ rührt von der Transformation auf das Intervall $[-1,1]$ her.) Aus (8.5) folgt mit Hilfe der Bernsteinschen Abschätzung (2.11)

$$(8.7) \qquad \left| R_m^{(k)}(f) \right| \leq 4 \cdot \frac{f^{(2m+2)}}{2^{2m+1} \cdot (2m+2)!} .$$

Für den Quotienten der Koeffizienten vor der Ableitung in (8.7) und (8.6) erhalten wir

$$(8.8) \qquad Q(m,k) = \frac{4}{2^{2m+1}} \cdot \frac{2^{m(m+1)} \cdot 4^{k(m+1)}}{2^{2m+2} \cdot |B_{2m+2}|} .$$

In Tabelle 4 haben wir für einige Werte von k und m die Größen Q(m,k) zusammengestellt.

Tabelle 4

| k | Q(m,k) | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| | m = 0 | m = 1 | m = 2 | m = 3 | m = 4 |
| 0 | 3 | $\frac{15}{8}$ | $\frac{21}{4}$ | 15 | 105,6 |
| 1 | 12 | 30 | 336 | 3840 | |
| 2 | 48 | 480 | 21504 | | |
| 3 | 192 | 7680 | | wachsend | |
| 4 | 768 | | | | |

Eine analytische Untersuchung von (8.8) zeigt, daß Q(m,k)

in k und m monoton wächst. Wie die Tabelle 4 zeigt, ist die Abschätzung (8.7) schon für kleinere Werte von k und m ziemlich ungünstig. Die Abschätzung (8.7) läßt sich aber für $k > 0$ verbessern. Denn das Verfahren von Romberg ist in jedem Intervall $I_\nu = \left[-1+2^{-k+1}\nu,\ -1+2^{-k+1}(\nu+1)\right]$ $(\nu = 0,1,\ldots,2^k-1)$ für Polynome von höchstens (2m+1)-ten Grad exakt (s. BAUER-RUTISHAUSER-STIEFEL [1963], Gleichung (42)). Wie in Paragraph 4 schätzen wir den Fehler in jedem Intervall $I_\nu$ gesondert ab.

$$(8.9) \qquad \left|R_m^{(k)}(f)\right| \leq 4\cdot 2^{-k} \cdot \sum_{\nu=0}^{2^k-1} E_{2m+1,\nu}(f) \ ,$$

wo $E_{2m+1,\nu}(f)$ die algebraische Approximationskonstante für $I_\nu$ bezeichnet. Mit Hilfe der Bernsteinschen Ungleichung (2.11) erhalten wir aus (8.9)

$$(8.10) \qquad \left|R_m^{(k)}(f)\right| \leq 4 \cdot \frac{2^{(-k+1)\cdot(2m+2)}}{2^{4m+3}\ (2m+2)!} \left\|f^{(2m+2)}\right\| \ ,$$

woraus

$$(8.11) \qquad \left|R_m^{(k)}(f)\right| \leq \frac{4\cdot 4^{-k(m+1)}}{2^{2m+1}\cdot(2m+2)!} \cdot \left\|f^{(2m+2)}\right\|$$

folgt. Ein Vergleich der rechten Seiten von (8.11) und (8.6) ergibt den von k unabhängigen Quotienten

$$(8.12) \qquad \hat{Q}(m) = \frac{4}{2^{2m+1}} \cdot \frac{2^{m(m+1)}}{2^{2m+2}} \cdot \frac{1}{\left|B_{2m+2}\right|} \ ;$$

es ergibt sich gerade der Wert von $q(m,o)$. Einige numerische Werte von $\hat{Q}(m)$ sind also in der ersten Zeile von Tabelle 4 zusammengestellt. Man sieht, daß die Abschätzung (8.9)

nur für kleinere Werte von m (etwa $m \leq 4$) günstig ist. Dies liegt daran, daß das Romberg-Verfahren einen niedrigen Exaktheitsgrad für Polynome besitzt. Während die Newton-Cotes-Formeln - die Gauß-Formeln sind noch günstiger - bei Verwendung von $2m+1$ Knoten für Polynome von $2m$-tem Grad exakt sind, benötigt das Romberg-Verfahren für denselben Exaktheitsgrad etwa $2^m$ Knoten. In diesen $2^m$ Knoten kann man aber f durch ein Polynom hohen Grades approximieren. Aus den Abschätzungen von EHLICH-ZELLER [1964, 1965] folgt, daß man bei $2^m$ Gitterpunkten den Grad des Approximationspolynoms ungefähr zu $\sqrt{2^{m+1}}$ wählen kann. Da aber dieses Polynom nicht mehr exakt integriert wird, muß man den Fehler dieses Polynoms berücksichtigen. Nach Satz 4.7 ergibt sich somit die Abschätzung

$$(8.13) \qquad \left|R_m^{(o)}(f)\right| \leq 2 \cdot \left\{\varepsilon + E_r(f)\right\} \cdot \frac{1}{1-\frac{\varepsilon}{3}} + 2 \cdot E_r(f) + 2 \cdot \varepsilon + \left|R_m^{(o)}(P_r)\right| ,$$

falls $P_r$ ein Polynom von höchstens r-tem Grad ist, das in äquidistanten Knoten $x_i$ der Abschätzung

$$(8.14) \qquad \left|f(x_i) - P_r(x_i)\right| \leq \varepsilon \qquad (i = 0,1,\ldots,m)$$

genügt und $\varepsilon$ nach (4.9) bestimmt wird.

Für $k > 0$ wendet man wie in Paragraph 4 die Abschätzung (8.13) auf jedes Teilintervall $I_\nu$ ($\nu = 0,1,\ldots,2^k-1$) gesondert an und schätzt anschließend die Größen $E_{r,\nu}(f)$ nach Lemma 4.4 ab.

Wir erhalten dann folgende Abschätzung

$$(8.15)\qquad \left|R_m^{(k)}(f)\right| \leq 2^{-k+1}\cdot\sum_{\nu=0}^{2^{k-1}}\left[\left\{\varepsilon_\nu + E_{r,\nu}(f)\right\}\cdot\frac{1}{1-\frac{\varrho}{3}} + 2\cdot E_{r,\nu}(f) + 2\cdot\varepsilon_\nu\right] + \sum_{\nu=0}^{2^{k-1}}\delta_\nu ,$$

wobei $\delta_\nu$ der Quadraturfehler eines Polynoms $P_{r,\nu}(x)$ von höchstens r-tem Grad im Intervall $I_\nu = \left[-1+2^{-k+1}\cdot\nu\ ,-1+2^{-k+1}(\nu+1)\right]$ ($\nu = 0,1,\ldots,2^{k-1}$) sei, welches in den in $I_\nu$ gelegenen Gitterpunkten $x_i$ den Ungleichungen

$$(8.16)\qquad \left|f(x_i) - P_{r,\nu}(x_i)\right| \leq \varepsilon_\nu \qquad \text{für } x_i \in I_\nu$$

genügt. Die Größe $\varrho$ werde nach (4.9) bestimmt.

## § 9. Fehlerschranken für Gregory-Formeln

Wir wenden unsere Abschätzungsmethode im folgenden auf die Quadraturformeln von Gregory an. Diese Formeln haben die Gestalt

$$(9.1)\qquad \int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \frac{2}{n}\left\{\sum_{\nu=0}^{n} f\left(-1+\frac{2\nu}{n}\right) - \sum_{\varrho=0}^{r} L_{\varrho+1}\left[\nabla_n^{\varrho} + (-1)^{\varrho}\Delta_0^{\varrho}\right]\right\} + R_n^{(r)}(f)$$

mit gewissen Konstanten $L_\varrho$ und den vorwärts bzw. rückwärts genommenen Differenzen $\Delta_0^\varrho$ bzw. $\nabla_n^\varrho$. Für das auftretende Fehlerglied gilt

$$(9.2)\qquad R_n^{(r)}(P_m) = 0 \text{ , falls } P_m \text{ ein Polynom vom Grad } P_m \leq \begin{cases} r+1 & \text{für gerades } r \\ r & \text{für ungerades } r \end{cases}$$

ist (vgl. MARTENSEN [1964]). Für $r = n$ stimmt die Formel (9.1) mit einer Newton-Cotes-Formel überein. Deshalb treten für höhere Werte von r in der Darstellung

$$(9.3)\qquad R_n^{(r)}(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} a_k^{(r)} \cdot f\left(-1+\frac{2k}{n}\right)$$

der Gregory-Formel (9.1) auch negative Werte $a_k^{(r)}$ auf. Nach Satz 2.1 erhalten wir die Schranke

$$(9.4)\qquad \left|R_n^{(r)}(f)\right| \leq \left\{2 + \sum_{k=0}^{n}\left|a_k^{(r)}\right|\right\} \cdot \begin{cases} E_{r+1}(f) & \text{für ger. } r \\ E_r(f) & \text{für ungr. } r. \end{cases}$$

Um eine günstigere Abschätzung zu gewinnen, könnte man daran denken, höhere Differenzen zu verwenden. Dies führt auf eine Fehlerschranke der folgenden Art:

$$(9.5) \qquad \left|R_n^{(r)}(f)\right| \leq \left\{2 + \sum_{k=0}^{n} \left|a_k^{(\tilde{r})}\right|\right\} \cdot E_{\tilde{r}+1}(f) + \left|\frac{2}{n} \cdot \sum_{\varrho=r+1}^{\tilde{r}} L_{\varrho+1} \cdot \left[\nabla_n^{\varrho} + (-1)^{\varrho} \cdot \Delta_0^{\varrho}\right]\right|$$

mit einer geraden natürlichen Zahl $\tilde{r}$, welche der Beziehung $r \leq \tilde{r} \leq n$ genügt. Diese Abschätzung kann in manchen Fällen zu brauchbaren Schranken führen. Sie hat aber den Nachteil, daß höhere Differenzen berechnet werden müssen. Außerdem sind die Gewichte $a_k^{(\tilde{r})}$ möglicherweise von verschiedenem Vorzeichen, so daß der Term $\sum_{k=0}^{n} \left|a_k^{(\tilde{r})}\right|$ unter Umständen stark anwachsen kann.

Vom numerischen Standpunkt aus gesehen, sind wohl für Gregory-Formeln (wie auch für die zusammengesetzten Newton-Cotes-Formeln) die Abschätzungen nach Paragraph 4 am besten geeignet. Denn bei diesen Formeln verwenden wir viele Punkte zur Quadratur. Wir brauchen also f nur an relativ wenigen zusätzlichen Stellen auszuwerten, um die Abschätzungen nach Satz 4.5 anwenden zu können.

## § 10. Numerische Integration von Funktionen mehrerer Variablen

Wir gehen im folgenden auf das Problem der numerischen Integration einer Funktion von zwei Veränderlichen über einen kompakten Bereich $\mathcal{Z}$ der reellen Ebene ein. Wir zeigen, daß man die oben hergeleiteten Methoden prinzipiell auch auf diesen Fall und in analoger Weise auch auf Funktionen von mehr als zwei Veränderlichen anwenden kann.

Vorgegeben sei folgende Quadraturformel

$$(10.1)\quad \begin{cases} \displaystyle\int_{\mathcal{Z}} f(x,y)\,dx\,dy = \sum_{\kappa,\lambda}^{\kappa,\lambda} a_\kappa \cdot b_\lambda \cdot f(x_\kappa, y_\lambda) + R_{m,n}(f) \\ R_{m,n}(P_{mn}) = 0 \text{ , falls } P_{mn}(x,y) \text{ ein Polynom} \\ \qquad\qquad \text{vom Grad } \leq m \text{ in } x \text{ und } \leq n \text{ in } y \text{ ist.} \end{cases}$$

Wie bei Funktionen von einer Veränderlichen läßt sich folgende Fehlerabschätzung beweisen:

Lemma 10.1.

Es sei $E_{mn}(f) = \inf\limits_{P_{mn}} \left\{ \max\limits_{(x,y)\in\mathcal{Z}} \left| f(x,y) - P_{mn}(x,y) \right| \right\}$.

Dann gilt für die Quadraturformel (10.1) die Fehlerabschätzung

$$(10.2)\quad \left| R_{m,n}(f) \right| \leq 2 \cdot I(\mathcal{Z}) \cdot E_{mn}(f) \text{ ,}$$

wobei $I(\mathcal{Z}) = \int_{\mathcal{Z}} dx\,dy$ gesetzt sei.

Man beachte, daß die Minimalabweichung $E_{mn}(f)$ viel schwieriger als im eindimensionalen Fall zu berechnen ist, da der Alternantensatz im allgemeinen nicht gilt. Man wird

deshalb Gitterabschätzungen verwenden. Zu diesem Zweck leiten wir eine Abschätzung her, welche bei EHLICH-ZELLER [1965] angedeutet ist.

Lemma 10.2. (Gitterabschätzungen für das Einheitsquadrat)

In den Punkten

$$(10.3) \qquad (x_\nu, y_\mu) = \left(-1+\frac{2\nu}{N}, -1+\frac{2\mu}{M}\right) \text{ mit } \begin{cases} \nu = 0,1,\dots,N \\ \mu = 0,1,\dots,M \end{cases}$$

gelte die Abschätzung

$$(10.4) \qquad \left|P_{ik}(x_\nu, y_\mu)\right| \leq 1 .$$

Dann gilt

$$(10.5) \qquad \max_{-1\leq \frac{x}{y}\leq 1} \left|P_{ik}(x,y)\right| \leq \frac{1}{1-\frac{s(i)}{3}} \cdot \frac{1}{1-\frac{s(k)}{3}}$$

$$\text{mit } \begin{cases} s(i) := \dfrac{i^2\cdot(i^2-1)}{6\cdot N^2} , & N > \dfrac{1}{\sin\frac{\pi}{i}\cdot\sin\frac{\pi}{2i}} \\ s(k) := \dfrac{k^2\cdot(k^2-1)}{6\cdot M^2} , & M > \dfrac{1}{\sin\frac{\pi}{k}\cdot\sin\frac{\pi}{2k}} \end{cases}$$

Beweis:

Nach EHLICH-ZELLER [1965] gilt für alle $x \in [-1,1]$ die Ungleichung

$$(10.6) \qquad \left|P_{ik}(x,y_\mu)\right| < \frac{1}{1-\frac{s(k)}{3}} .$$

Durch erneute Anwendung desselben Schlusses folgt dann aus (10.6) die Abschätzung

$$(10.7) \qquad \left|P_{ik}(x,y)\right| < \frac{1}{1-\frac{s(i)}{3}} \cdot \frac{1}{1-\frac{s(k)}{3}} \qquad \text{für } \frac{x}{y} \in [-1,1] .$$

Analog läßt sich für Čebyšev-Gitter

$$(10.8) \qquad (x_\nu, y_\mu) = \left(-\cos\frac{i\pi}{N}\right), -\cos\frac{k\pi}{M}\right) \text{ mit } \begin{cases} \nu = 0,\dots,N \\ \mu = 0,\dots,N \end{cases}$$

die Abschätzung

$$(10.9) \qquad \max_{-1 \le \frac{x}{y} \le 1} \left| P_{ik}(x,y) \right| \le \frac{1}{\cos \frac{i\pi}{2N}} \cdot \frac{1}{\cos \frac{k\pi}{2M}}$$

beweisen.

Lemma 10.3. (Anwendung auf die Čebyšev-Approximation)

In den Gitterpunkten (10.3) gelte eine Abschätzung der Form

$$(10.10) \qquad \left| f(x_\nu, y_\mu) - P_{ik}(x_\nu, y_\mu) \right| \le \varepsilon .$$

Dann gilt

$$(10.11) \qquad \max_{-1 \le \frac{x}{y} \le 1} \left| f(x,y) - P_{ik}(x,y) \right| \le \left\{ \varepsilon + E_{ik}(f) \right\} \frac{1}{1 - \frac{s(i)}{3}} \cdot \frac{1}{1 - \frac{s(k)}{3}} + E_{ik}(f) .$$

Zusammenfassend erhält man folgende Fehlerschranken .

Satz 10.4. (Gitterabschätzung für Quadraturformeln)

Im Einheitsquadrat $I = \left\{ (x,y) \;\middle|\; -1 \le \frac{x}{y} \le 1 \right\}$ gelte mit einem Polynom $P_{mn}(x,y)$ in den Punkten (10.3) eine Abschätzung der Form

$$(10.12) \qquad \left| f(x_\nu, y_\mu) - P_{mn}(x_\nu, y_\mu) \right| \le \varepsilon .$$

Dann läßt sich der Fehler der Quadraturformel (10.1) abschätzen in der Form

$$(10.13) \qquad \left| R_{m,n}(f) \right| \le 4 \cdot \left[ \left\{ \varepsilon + E_{ik}(f) \right\} \frac{1}{1 - \frac{s(i)}{3}} \cdot \frac{1}{1 - \frac{s(k)}{3}} + E_{ik}(f) \right] .$$

In analoger Weise lassen sich auch die Abschätzungen von Paragraph 4 auf den Fall, daß die Quadraturformel (10.1) durch "Zusammenstückeln" entstanden ist, übertragen.

Literaturverzeichnis

BAUER, F.L.; H. RUTISHAUSER and E. STIEFEL [1963]: New aspects in numerical quadrature. Proc.Symp.Appl. Math. XV., 199-218.

BARNHILL, R.E., and J.A. WIXOM [1967]: Quadratures with remainders of minimum norm I, II. Math. Comp. 21, 66-75, 382-387.

CLENSHAW, C.W., and A.R. CURTIS [1960]: A method for numerical integration on an automatic computer. Num. Math. 2, 197-205.

DAVIS, P.J. [1953]: Errors of numerical approximation for analytic functions. Journ. Rat. Mech. Anal. 2, 303-314.

--- [1962]: Errors of numerical approximation for analytic functions.- Survey of numerical analysis, J. Todd ed., 468-484. New York: McGraw-Hill.

DAVIS, P.J., and P. RABINOWITZ [1954]: On the estimation of quadrature errors for analytic functions. Math. Tables. Aids Comp. 8, 193-203.

--- [1966]: Numerical integration. New York: Blaisdell.

EHLICH, H., u. K. ZELLER [1964]: Schwankung von Polynomen zwischen Gitterpunkten. Math. Z. 86, 41-44.

--- [1965]: Numerische Abschätzung von Polynomen. ZAMM 45, T 20-22.

ELLIOT, D. [1964]: The evaluation and estimation of the coefficients in the Chebyshev series expansion of a function. Math. Comp. 18, 274-284.

ELLIOT, D., and G. SZEKERES [1965]: Some estimates of the coefficients in the Chebyshev series expansion of a function. Math. Comp. 19, 25-32.

FRASER, W., and M.W. WILSON [1966]: Remarks on the Clenshaw-Curtis quadrature scheme. SIAM Review 8, 322-327.

HÄMMERLIN, G. [1963]: Über ableitungsfreie Schranken für Quadraturfehler. Num. Math. 5, 226-233.

--- [1965]: Über ableitungsfreie Schranken für Quadraturfehler. II. Ergänzungen und Möglichkeiten zur Verbesserung. Num. Math. 7, 232-237.

--- [1966]: Zur Abschätzung von Quadraturfehlern für analytische Funktionen. Num. Math. 8, 334-344.

HILDEBRAND, F.B. [1956]: Introduction to numerical analysis. New York: McGraw-Hill.

IMHOF, J.P. [1963]: On the method for numerical integration of Clenshaw and Curtis. Num. Math. 5, 138-141.

KRYLOV, V.J. [1962]: Approximate calculation of integrals. New York: The Macrillan Company.

LO, Y.T.; S.N. LEE and B. SUN [1965]: On Davis' method of estimating qudrature errors. Math. Comp. 19, 133-138.

McNAMEE, J. [1964]: Error-bounds for the evaluation of integrals by the Euler-MacLaurin formula and by Gauss-type formulae. Math. Comp. 18, 368-381.

MARTENSEN, E. [1964]: Optimale Fehlerschranken für die Quadraturformel von Gregory. ZAMM 44, 159-168.

MEINARDUS, G. [1964]: Approximation von Funktionen und ihre numerische Behandlung. Berlin-Göttingen-Heidelberg-NewYork: Springer-Verlag.

NATANSON, J.P. [1955]: Konstruktive Funktionentheorie. Berlin: Akademie-Verlag.

PASZKOWSKI, S. [1962]: The theory of uniform approximation. I. Non asymptotic theoretical problems. Rozprawy Matematycne, Warschau.

SCHÖNHAGE, A. [1961]: Fehlerfortpflanzung bei Interpolation. Num. Math. 3, 62-71.

STALLEY, R. [1949]: A generalisation of the geometric series. Amer. Math. Monthly 56, 325-327.

STENGER, F. [1966]: Bounds on the error of Gauss-type quadratures. Num. Math. 8, 150-160.

STETTER, F. [1966]: Fehlerabschätzungen für Runge-Kutta-Verfahren. Diss. Tübingen.

--- [1968]: Ableitungsfreie Schranken für die numerische Integration. Computing 2, 257-268.

STROUD, A.H. [1966]: Estimating quadrature errors for functions with low continuity. Journ. SIAM Num. Anal. 3, 420-424.

STROUD, A.H.; and D. SECREST [1966]: Gaussian quadrature formulas. Englewood Cliffs: Prentice-Hall.

WILF, H.S. [1964]: Exactness conditions in numerical quadrature. Num. Math. 6, 315-319.

ZELLER, K. [1966]: Diskretisierung von Funktionen. Int. Math.-Kongreß Moskau, Resümees 14,22.
(Siehe auch: Datenverarbeitung im europäischen Raum, Graz 1966.)

# L e b e n s l a u f

Am 27. April 1942 wurde ich, Franz Locher, als Sohn des Mechanikermeisters Albert Locher und seiner Ehefrau Franziska, geb. Mattes, in Fridingen, Kreis Tuttlingen, geboren.

Nach dem Besuch der Volksschule Fridingen war ich von 1952 an Schüler des Gymnasiums Tuttlingen. Im Frühjahr 1961 bestand ich die Reifeprüfung. Dann begann ich das Studium der Mathematik und Physik an der Universität Tübingen, wo ich im Juli 1966 die Diplomprüfung in Mathematik ablegte.

Anschließend war ich als Verwalter einer wissenschaftlichen Assistentenstelle am Mathematischen Institut der Universität Tübingen angestellt. In dieser Zeit entstand unter der Anleitung von Prof. Dr. K. Zeller die vorliegende Arbeit "Approximationsverfahren zur Gewinnung von ableitungsfreien Schranken für Quadraturfehler".

Meine akademische Ausbildung verdanke ich den Herren Professoren W. Braunbek, H. Ehlich, H. Kneser, H. Krüger, G. Möllenstedt, M. Müller, G. Pickert, P. Roquette, H. H. Schaefer, W. Vogel, H. Wielandt und K. Zeller.

Druck: Poly-Druck Dr. Vogt KG
Stuttgart, Kistlerstraße 13a
Tel. 8 01 13 13

Druck: Polyfoto Dr. Vogt KG
Stuttgart 1, Königstraße 19a
Telefon 291063